



Georg-August-Universität
Göttingen
Zentrum für Informatik

ISSN 1612-6793
Nummer zfi-msc-2012-01

Masterarbeit
im Studiengang „Angewandte Informatik“

Analyse von Kernelvariationen für die Smoothed Particle Hydrodynamics Methode

Stefan Saalfeld

am Institut für
Numerische und Angewandte Mathematik

Bachelor- und Masterarbeiten
des Zentrums Informatik
an der Georg-August-Universität Göttingen
18. April 2012

Georg-August-Universität Göttingen
Zentrum für Informatik

Lotzestraße 16-18
37083 Göttingen
Germany

Tel. +49 (551) 39-1 44 02
Fax +49 (551) 39-1 44 03
E-Mail office@informatik.uni-goettingen.de
WWW www.informatik.uni-goettingen.de

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Göttingen, den 18.04.2012

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	VI
Tabellenverzeichnis	VIII
Symbolverzeichnis	IX
1 Einleitung	1
2 Grundlagen	3
2.1 Vektoranalytische Begriffe	3
2.2 Transportproblem	4
2.3 Bilanzgleichungen	6
2.4 Zustandsgleichungen	7
2.5 Newtonsche Fluide	8
2.6 Randbedingungen	9
2.7 Anfangswertprobleme	10
3 Smoothed Particle Hydrodynamics Methode	13
3.1 Bisherige Arbeiten auf diesem Gebiet	14
3.2 Herleitung der SPH Methode	18
3.3 Modellierung der verschiedenen Kraftterme	23
3.4 Algorithmus der SPH Methode	27
3.5 Energiebetrachtung	27
4 Randbehandlung bei der SPH Methode	30
4.1 Oberflächennetz	30
4.2 Wandpartikel	32
4.3 Lennard-Jones Potential	34
4.4 Geisterpartikel	35
4.5 Zusammenfassung	36
5 Kernelfunktionen	37
5.1 Eigenschaften von Kernelfunktionen	37
5.2 <i>poly6</i> -Kernelfunktion	39
5.3 <i>spiky</i> -Kernelfunktion	40
5.4 <i>C2</i> -Kernelfunktion	41

6	Hintergrundgitter zur Partikelkommunikation	43
6.1	Quadtree	44
6.2	Octree	46
6.3	KD-Tree	47
6.4	Gleichverteilung	50
6.5	Zusammenfassung	51
7	SPH Simulationen zur Analyse verschiedener Randbehandlungen	52
7.1	Startkonfiguration für die Randanalyse	52
7.2	Elastischer Stoß	54
7.3	Wandpartikel	58
7.4	Kombination von elastischem Stoß und Wandpartikeln	65
7.5	Bewertung der Ergebnisse	67
8	SPH Simulationen zur Analyse von Kernelvariationen	69
8.1	Vergleich der Dichteänderung bei verschiedenen Kernelfunktionen	70
8.2	Kernelfunktionen beim Dammbuchproblem	73
8.3	Kernelfunktionen bei verschiedenen Medien	83
8.4	Bewertung der Ergebnisse	90
9	Zusammenfassung und Ausblick	91
	Literaturverzeichnis	94

Abbildungsverzeichnis

1	Prinzipskizze einer ebenen Schichtenströmung zwischen fester und bewegter Wand	8
2	Darstellung zweier Trajektorien zu einem Anfangswertproblem	11
3	Simulation des Füllens eines Glases mit der SPH Methode [MCG03]	15
4	SPH Simulation eines Dammbbruchs mit Anwendung der lokalen Verfeinerung [LR11]	17
5	SPH Simulation eines fallenden Tropfens mit Anwendung der lokalen Verfeinerung [LR11]	17
6	Approximierte Dirac-Delta-Funktion	18
7	Elastischer Stoß eines Partikels am Rand	31
8	Elastischer Stoß eines Partikels in einer Ecke	32
9	Die Kraft durch das Lennard-Jones Potential über den Wandabstand aufgetragen	35
10	Positionierung von Geisterpartikeln	36
11	Darstellung der <i>poly6</i> -Kernelfunktion	39
12	Darstellung der <i>spiky</i> -Kernelfunktion	40
13	Darstellung der <i>C2</i> -Kernelfunktion	42
14	Unterteilungsschritte eines Quadtrees	44
15	Nachbarschaftssuche in einem Quadtree	45
16	Unterteilungsschritte eines Octree	46
17	Unterteilung eines KD-Trees (2D)	49
18	Startkonfiguration für die Randanalyse	53
19	Simulation mit elastischem Stoß als Randbehandlung	55
20	Druckerhöhung am Rand beim elastischen Stoß	56
21	Energieverlauf beim elastischen Stoß	57
22	Simulation mit Wandpartikeln als Randbehandlung	59

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

23	Energieverlauf mit Wandpartikeln als Randbehandlung	60
24	Simulation mit modifizierter Dichteberechnung der Wandpartikel . . .	62
25	Energieverlauf mit modifizierter Dichteberechnung der Wandpartikel .	63
26	Simulation mit Abstandsfunktion zu den Wandpartikeln	64
27	Energieverlauf mit Abstandsfunktion zu den Wandpartikeln	65
28	Simulation mit einer Kombination aus elastischem Stoß und modifi- zierten Wandpartikeln als Randbehandlung	66
29	Energieverlauf mit einer Kombination aus elastischem Stoß und mo- difizierten Wandpartikeln	67
30	Analyse des Dichtedurchschnittes mit großer Fluidtiefe	72
31	Analyse des Dichtedurchschnittes mit geringer Fluidtiefe	73
32	Vergleich der ermittelten Dichten	73
33	Schema des Dammbbruchs	74
34	Vergleich der Fluidbreiten von experimentellen Daten und Simulati- onsergebnissen beim Dammbbruch	75
35	Dammbbruch nach 0,3 Sekunden	77
36	Dammbbruch nach 0,7 Sekunden	78
37	Dammbbruch nach 1,1 Sekunden	79
38	Dammbbruch nach 10 Sekunden	80
39	Energieverlauf beim Dammbbruch (<i>C2</i> -Kernelfunktion)	81
40	Energieverlauf beim Dammbbruch (<i>poly6</i> -Kernelfunktion)	82
41	Energieverlauf beim Dammbbruch (<i>spiky</i> -Kernelfunktion)	82
42	Startkonfiguration von zwei Medien	83
43	Zwei Medien nach 0,3 Sekunden	85
44	Zwei Medien nach 1,5 Sekunden	86
45	Zwei Medien mit <i>C2</i> -Kernelfunktion	87
46	Zwei Medien mit <i>spiky</i> -Kernelfunktion	88
47	Energieverlauf bei zwei Medien (<i>C2</i> -Kernelfunktion)	89
48	Energieverlauf bei zwei Medien (<i>spiky</i> -Kernelfunktion)	89

Tabellenverzeichnis

1	Randbedingungen für Impuls- und Energiegleichung	10
2	Auszuwertende Gleichungen im SPH Algorithmus	28
3	Eigenschaften von Kernelfunktionen für die SPH Methode	38
4	Vergleich der verschiedenen Randbehandlungen	68
5	Analyse der untersuchten Kernelfunktionen	90

Symbolverzeichnis

α	Problemspezifischer Faktor der künstlichen Viskosität
\mathbf{D}	Verzerrungsgeschwindigkeitstensor
Δt	Zeitschrittweite
$\delta(\cdot)$	Dirac-Delta-Funktion
$\dot{\gamma}$	Scherrate
\dot{q}	Wärmestrom
\mathbf{F}	Kraft
\mathbf{f}	Kraft pro Masse
\mathbf{f}^g	Kraft pro Masse durch Gravitation
\mathbf{f}^μ	Kraft pro Masse durch Viskosität
\mathbf{f}^p	Kraft pro Masse durch Druck
\mathbf{g}	Gravitationsvektor
\mathbf{L}	Geschwindigkeitsgradiententensor
μ	Dynamische Viskosität
ν	Kinematische Viskosität
Π	Künstliche Viskosität
ρ	Dichte
ρ_{ij}	Mittlere Dichte zweier Partikel
ρ_{ref}	Referenzdichte
ρ_{wref}	Referenzdichte der Wandpartikel
\mathbf{r}	Abstand zwischen zwei Punkten
τ	Schubspannung
Θ	Diffusiver Term der Impulserhaltungsgleichung
∇	Nabla-Operator
∇^2	Laplace-Operator
\mathbf{t}	Spannungsvektor
\mathbf{v}	Geschwindigkeit

SYMBOLVERZEICHNIS

\mathbf{x}	Position
a	Allgemeine physikalische Größe
b	Entdimensionalisierungsfaktor
c	Schallgeschwindigkeit
c_{ij}	Mittlere Schallgeschwindigkeit zweier Partikel
d	Skalierungsparameter des Lennard-Jones Potentials
E	Energie
E_{diss}	Energiedissipation
E_{kin}	Kinetische Energie
E_{pot}	Potentielle Energie
H	Höhe eines Partikels
h	Einflussradius eines Partikels
l	Mindestabstand zu Wandpartikeln bei Berechnung mit Abstandsfunktion
m	Masse
n	Anzahl der Nachbarpartikel
n_{fl}	Anzahl der Fluidnachbarpartikel
n_{neigh}	Anzahl der Wandnachbarpartikel
P	Partikel des Transportproblems
p	Druck
p_{ref}	Referenzdruck
R	Gaskonstante
r_{ref}	Initialer Partikelabstand
S	Dimensionslose Länge
s	Länge
T	Temperatur
V	Volumen
V_i	Volumen eines Partikels
$W(\cdot)$	Kernelfunktion
Z	Dimensionslose Zeit

1 Einleitung

Die Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Methode war ursprünglich eine Interpolationsmethode für Partikelsysteme. Sie wurde separat von Lucy [Luc77] sowie Gingold und Monaghan [GM77] entwickelt, um astrophysikalische Problemstellungen wie die Entstehung von Sternen zu simulieren. Der Name SPH kommt daher, dass sich mit diesem Partikelverfahren auch Simulationen von inkompressiblen Strömungen durchführen lassen. Solche Strömungen sind oft im Alltag zu finden. Insbesondere Wasserströmungen in einem Rohr, das Fließen von Wasser aus einem Hahn, oder die Umströmung von Schiffen können mit der SPH Methode simuliert werden. Auch Windströmungen bei Windkraftträdern, der Fahrtwiderstand von Verkehrsmitteln oder die Auftriebskraft beim Flugzeug können untersucht werden.

Bevor auf die SPH Methode im Detail eingegangen wird, erfolgt in Kapitel 2 die Erläuterung wie ein strömungsmechanisches Problem numerisch analysiert werden kann. Dazu werden mathematische Definitionen vorgenommen und notwendige Werkzeuge der numerischen Mathematik vorgestellt. Weiterhin wird das Transportproblem und die Bilanzgleichungen, welche für die Berechnungen der Strömungssimulation genutzt werden, vorgestellt.

Die Idee der SPH Methode wird in Kapitel 3 beschrieben. Dazu werden zunächst die Ergebnisse angesprochen, die bisher mit der SPH Methode erzielt wurden und in der Literatur nachzulesen sind. Danach folgt die Herleitung des Verfahrens unter Betrachtung der strömungsmechanischen Gleichungen. Die Lösung von den Grundgleichungen der Strömungsmechanik stellt die Grundlage für numerische Simulationen dar. In diesem Kapitel wird zudem der Algorithmus der in dieser Arbeit verwendeten SPH Methode anhand der Gleichungen dargestellt.

Die Strömungssimulation findet innerhalb eines vordefinierten Gebietes statt. Ein Rand muss definiert werden, welcher dafür sorgt, dass die Partikel innerhalb des Gebietes bleiben oder dass eine Wirkung auf das Fluid ausgeübt wird, sodass die randnahen Partikel in das Simulationsgebiet zurückgedrängt werden. Dazu werden

in Kapitel 4 verschiedene Möglichkeiten der Modellierung des Randes vorgestellt.

Die SPH Methode nutzt, wie ihr Name schon erwarten lässt, Partikel für die Darstellung der Strömungssimulation. Jedoch repräsentiert ein SPH Partikel hier nicht einen Punkt, sondern einen Bereich im Raum. Dadurch besitzt dieser ein Volumen und wirkt auf andere Partikel in seiner Umgebung. Eine Kernfunktion wird genutzt, um diesen Einfluss durch eine Interpolation über Nachbarpartikel zu realisieren. In dieser Arbeit wird anstelle des Begriffes „Kernfunktionen“ der Begriff „*Kernelfunktionen*“ verwendet, weil dieser zumeist in der Literatur verwendet wird. In Kapitel 5 werden die verschiedenen zu untersuchenden Kernelfunktionen näher erläutert. Zusätzlich werden die Eigenschaften die Kernelfunktionen für die SPH Methode besitzen müssen dargestellt.

Damit ein Partikel mit seinen Nachbarpartikeln kommunizieren kann, müssen sich die Partikel gegenseitig kennen. Die Nachbarn können mit einer Suche durch geeignete Datenstrukturen der Informatik ermittelt werden, siehe Kapitel 6.

Im Rahmen dieser Arbeit werden ausgewählte Randbehandlungen untersucht (siehe Kapitel 7), deren Grundlagen in Kapitel 4 vorgestellt werden. Als Ergebnis wird eine Randbehandlung identifiziert, die stabil genug ist, um für die Untersuchungen der Variationen der Kernelfunktionen zu dienen.

Das Ziel dieser Arbeit ist weiterhin, eine SPH Methode zu implementieren und mit dieser Untersuchungen bezüglich der Auswirkungen verschiedener Kernelfunktionen vorzunehmen. Dabei wird ermittelt, welche Kernelfunktion geeignet ist, um stabile und genaue Simulationen durchzuführen. Als Maß für die Güte der Simulation erfolgt die Betrachtung der Energieanteile des Systems, so kann festgestellt werden, ob Energie während der Simulation erzeugt wird oder verloren geht. Dies soll jedoch nicht der Fall sein, weil es dem Energieerhaltungssatz widersprechen würde. Weiterhin soll festgestellt werden, wie stark sich die Energiedissipation auf die Energiebilanz auswirkt. Als weiteres Kriterium der Untersuchung wird die Stabilität betrachtet. Dazu werden verschiedene Anwendungsfälle mit den Kernelfunktionen simuliert und anschließend, siehe Kapitel 8, miteinander verglichen. Es handelt sich bei den untersuchten Anwendungsfällen insbesondere um ein Dammbrechproblem, die Simulation zwei verschiedener, aufeinandertreffender Medien und einen Vergleich zur Dichteänderung bei der SPH Methode.

Eine abschließende, zusammenfassende Bewertung der vorgestellten Anwendungsfälle findet in Kapitel 9 statt. Dort werden ebenfalls Anregungen für weiterführende Arbeiten gegeben.

2 Grundlagen

Bei der SPH Methode finden mathematische und strömungsmechanische Grundlagen Anwendung, die in diesem Kapitel dargestellt werden. Dazu werden in Abschnitt 2.1 der Nabla- und der Laplace-Operator eingeführt, die für viele Herleitungen benötigt werden. Im Abschnitt 2.2 wird allgemein beschrieben, was ein Transportproblem ist und zwei Arten der Formulierung eines Transportproblems werden vorgestellt. Die strömungsmechanischen Berechnungen basieren auf Bilanzgleichungen, die in Abschnitt 2.3 erläutert werden. Danach wird in Abschnitt 2.4 die thermische Zustandsgleichung für ideale Gase eingeführt. Im Abschnitt 2.5 wird erklärt, was ein Newtonsches Fluid ist. Weiterhin folgt in Abschnitt 2.6 die Vorstellung der verschiedenen Arten von Randbedingungen. Abschließend wird in Abschnitt 2.7 dargestellt, was ein Anfangswertproblem ist. In diesem Zusammenhang erfolgt die Vorstellung zweier numerischer Verfahren zum Lösen solcher Probleme.

2.1 Vektoranalytische Begriffe

Der Nabla- und der Laplace-Operator werden in dieser Arbeit genutzt, um einige strömungsmechanische Herleitungen durchzuführen. Zur Vereinfachung wird der Nabla-Operator

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (1)$$

als symbolischer Vektor eingeführt. Dieser beschreibt den Gradienten, also die räumliche Ableitung, einer Größe. Damit lässt sich der Gradient eines Skalarfeldes als ∇s , der Gradient eines Vektorfeldes als $\nabla \mathbf{v}$ und die Divergenz eines Vektorfeldes als $\nabla \cdot \mathbf{v}$ darstellen. Aus den Definitionen der einzelnen Operationen ergibt sich diese Darstellung. Dies kann am Beispiel des Gradienten eines Skalarfeldes verdeutlicht

werden

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial s}{\partial x} \\ \frac{\partial s}{\partial y} \\ \frac{\partial s}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} s = \nabla s. \quad (2)$$

Ein Gradient ist eine Beschreibung der Änderung des Skalar- oder Vektorfeldes, auf das es angewandt wird. Der Gradient eines Skalarfeldes zeigt in die Richtung der größten Änderung, bei einem Höhenfeld ist das der größte Anstieg.

Der Laplace-Operator wird durch das Skalarprodukt des Nabla-Operators mit sich selbst definiert.

$$\nabla^2 = \nabla \cdot \nabla \quad (3)$$

Dieser kann auf skalaren und auf vektoriellen Funktionen definiert werden. Zum Beispiel auf eine skalare Größe angewandt, ergibt das

$$\nabla^2 s = \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial z^2}. \quad (4)$$

2.2 Transportproblem

In diesem Abschnitt soll erklärt werden, was in der Kontinuumsmechanik unter einem Transportproblem verstanden wird (vgl. [Gun12]). Zur Veranschaulichung wird ein Beispiel aus dem alltäglichen Leben herangezogen. Strömungen sind spezielle Transportprobleme. Hier soll dies durch die Bewegung von Personen in einem Kaufhaus dargestellt werden. Die Personen sind die einzelnen Elemente der Strömung. Diese besitzen verschiedene Eigenschaften, auch Transportgrößen genannt. Beispielsweise bewegen sich die Personen mit einer Geschwindigkeit und haben eine bestimmte Menge an Waren in ihrem Einkaufskorb. Soll nun diese Strömung auf gewisse Eigenschaften untersucht werden, dann kann dies mit zwei verschiedenen Betrachtungen erfolgen, zum einen mit der Eulerschen Beschreibung und zum anderen mit der Lagrangeschen Beschreibung.

Für die Lagrangesche Beschreibung kann beispielsweise ein Kunde betrachtet werden, der sich an eine Kasse anstellen möchte, an der das Voranschreiten schneller als an den anderen Kassen erfolgt, also die Geschwindigkeit hoch ist. Er bewegt sich selbst und beobachtet dabei die anderen Personen der Strömung. Er muss die Anzahl der Personen, deren Bewegungen und die Anzahl der Waren pro Person an

den unterschiedlichen Kassen vergleichen und bewerten.

Als Beispiel im Eulerschen können die Kassen als separate Bereiche definiert werden. In jedem Bereich, also an jeder Kasse, kann die Geschwindigkeit der Personen und die Menge ihrer Waren untersucht werden. Damit kann die Effizienz der Kassierer verglichen werden. Die Idee der Eulerschen Betrachtung liegt darin, kleine Kontrollvolumen zu definieren, bei denen die Änderungen über ihre Ränder beschrieben werden.

Um das Transportproblem mathematisch zu beschreiben, werden für die Lagrange'sche Betrachtung die Personen als Partikel P betrachtet. Eine Transportgröße, wie zum Beispiel die Waren w , die ein Partikel zum Zeitpunkt t besitzt, werden mit der Gleichung

$$w = w(P, t) \tag{5}$$

bestimmt. Um die zeitliche Änderung der Transportgröße eines Partikels zu ermitteln, wird die materielle Ableitung $\frac{D}{Dt}$ genutzt. Mit der Kettenregel folgt

$$\frac{Dw(P, t)}{Dt} = \frac{\partial w(P, t)}{\partial t} + \frac{\partial w(P, t)}{\partial P} \frac{dP}{dt}. \tag{6}$$

Das Partikel ändert sich nicht über die Zeit. Damit gilt $\frac{dP}{dt} = 0$ und die Gleichung (6) vereinfacht sich zu

$$\frac{Dw(P, t)}{Dt} = \frac{\partial w(P, t)}{\partial t}. \tag{7}$$

Bei der Eulerschen Betrachtung wird das gesamte Simulationsgebiet in Zellen unterteilt. Damit soll garantiert werden, dass jedes Partikel zu jedem Zeitpunkt in einem Gebiet erfasst ist. Jede Zelle beschreibt einen festen Punkt \mathbf{x} , sodass die Transportgröße w zum Zeitpunkt t mit der Gleichung

$$w = w(\mathbf{x}, t) \tag{8}$$

bestimmt wird. Auch hier wird die Änderung der Transportgröße über die materielle Ableitung $\frac{D}{Dt}$ ermittelt. Analog zu Gleichung (6) mit Hilfe der Kettenregel folgt

$$\frac{Dw(\mathbf{x}, t)}{Dt} = \frac{\partial w(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \frac{\partial w(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{dt}. \tag{9}$$

Hierbei muss der konvektive Term beibehalten werden und kann zu $\frac{\partial w(\mathbf{x}, t)}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \nabla w(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ umgeformt werden, wenn die Geschwindigkeit \mathbf{v} als Zeitableitung

des Weges \mathbf{x} , d.h. $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{v}$ beschrieben wird. Der konvektive Term beschreibt die Änderungen der Transportgröße w über die Oberfläche der Zelle.

2.3 Bilanzgleichungen

Die strömungsmechanischen Berechnungen basieren auf drei Bilanzgleichungen (vgl. [Oer95]), der Impulserhaltung, der Massenerhaltung und der Energieerhaltung. Viele in der Natur vorkommenden Strömungen können mit diesen allgemeingültigen Gleichungen beschrieben werden. Zusammen bilden die drei Bilanzgleichungen ein nichtlineares, gekoppeltes, partielles Differentialgleichungssystem. Für dieses Gleichungssystem liegt eine analytische Lösung nur für stark vereinfachte Ausnahmen vor. Deshalb wurden numerische Verfahren entwickelt, welche Lösungen zu diesem Gleichungssystem approximieren.

Die Kontinuitätsgleichung, welche die Massenerhaltung beschreibt, wird mit der Gleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0 \quad (10)$$

dargestellt. Hierbei sind ρ die Dichte und \mathbf{v} die Geschwindigkeit. Damit ergibt sich im dreidimensionalen kartesischen Koordinatensystem die Gleichung

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \mathbf{v}_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho \mathbf{v}_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \mathbf{v}_z) \quad (11)$$

mit der Geschwindigkeitskomponente \mathbf{v}_x in Richtung x , \mathbf{v}_y in Richtung y und \mathbf{v}_z in Richtung z . Die Kontinuitätsgleichung lässt die Massenänderung eines Kontrollvolumens nur über den Ab- und Zufluss von Masse über dessen Ränder zu. Dabei wird vorausgesetzt, dass Masse nicht erzeugt und vernichtet wird.

Der Impuls eines infinitesimalen Fluidelements und die Kräfte, die auf dieses wirken, werden durch die Impulserhaltungsgleichung in Beziehung zueinander gesetzt. Die Summe der wirkenden Kräfte bestimmen die zeitliche Änderung des Impulses. Die Impulserhaltungsgleichung ist somit

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g}. \quad (12)$$

Dabei ist \mathbf{g} der Gravitationsvektor, ν die kinematische Viskosität und der Term $\frac{D\mathbf{v}}{Dt}$ ist die materielle Ableitung der Geschwindigkeit \mathbf{v} . Das bedeutet für die Eulersche

Formulierung

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v}. \quad (13)$$

Diese Formulierung beschreibt vollständig die Änderung der Geschwindigkeit. In der Eulerschen Beschreibung erfolgt die Berechnung über die rechte Seite von Gleichung (13), da das Bezugssystem raumfest ist. Die linke Seite kann als mitbewegt interpretiert werden und führt auf die Lagrangesche Darstellung. Im Lagrangeschen Kontext ist die Formulierung der Impulserhaltungsgleichung mit der Gleichung

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v} + \mathbf{g} \quad (14)$$

gegeben: Dabei ist p der Druck und der Term $-\nabla p$ beschreibt die Druckkräfte, die über den Rand eines Fluidelements auf dieses wirken. Der Term $\nu\nabla^2\mathbf{v}$ steht für die übrigen Kräfte, die über den Fluidelementrand Einfluss auf das Fluidpartikel nehmen. Dies sind zum Beispiel Reibungen und Spannungen. Der letzte Term \mathbf{g} steht für die Gravitation, die auf das Fluidpartikel wirkt. Allgemeiner kann statt \mathbf{g} ein Volumenkraftvektor genutzt werden, der die Körperkräfte beschreibt, die nicht auf den Rand des Volumens sondern auf das Volumen selbst wirken. In den Betrachtungen dieser Arbeit ist dies einzig die Gravitation. Letztendlich verbirgt sich dahinter eine Kräftebilanz, welche die Grundlage für die SPH Methode ist.

Der Energieerhaltungssatz besagt, dass Energie weder erzeugt noch zerstört werden kann. Energie kann nur in andere Formen von Energie umgewandelt werden. Eine Formulierung der Energiegleichung kann durch die Multiplikation der differentiellen Impulserhaltungsgleichung (14) mit der Geschwindigkeit hergeleitet werden. Dies führt dann zu

$$\rho\mathbf{v} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\mathbf{v} \cdot \nabla p + \rho\nu\mathbf{v} \cdot \nabla^2\mathbf{v} + \rho\mathbf{v} \cdot \mathbf{g}. \quad (15)$$

Die Bilanzgleichungen werden im folgenden Kapitel 3 genutzt, um die SPH Methode herzuleiten.

2.4 Zustandsgleichungen

Die drei Grundgleichungen, die Massenerhaltung, die Impulserhaltung und die Energieerhaltung, besitzen mehr unbekannt Variablen als die Masse, den Impuls und

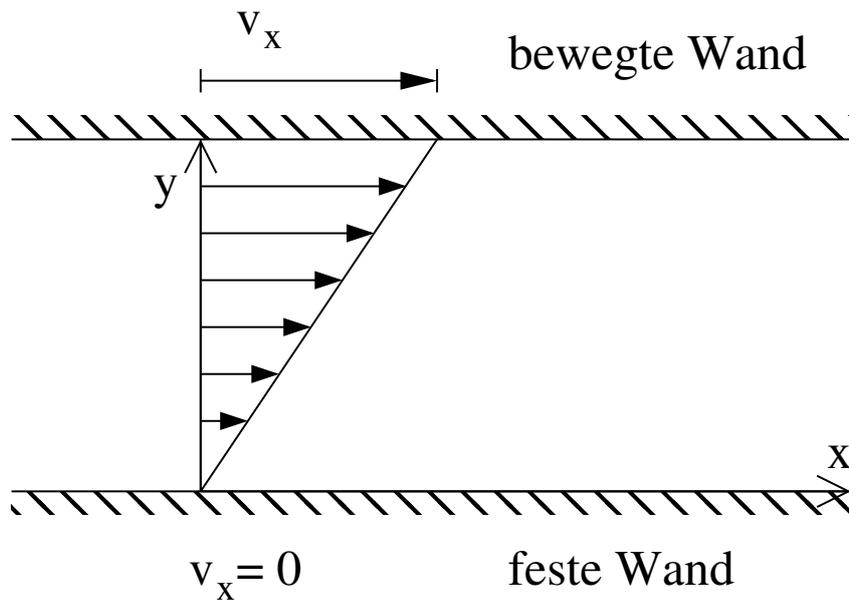


Abb. 1: Prinzipskizze einer ebenen Schichtenströmung zwischen fester und bewegter Wand

die Energie. Somit ist das dadurch gegebene Gleichungssystem allein nicht lösbar. Als weitere Gleichung kann die thermische Zustandsgleichung für ideale Gase hinzugenommen werden. Diese lautet

$$p = \rho RT. \quad (16)$$

Dabei ist R die Gaskonstante und T die Temperatur. Mit dieser Gleichung lässt sich der Druck durch die Dichte und die Temperatur bestimmen. Wenn die Temperatur konstant ist, dann ist der Druck proportional von der Dichte abhängig. Später wird dieser Zusammenhang genutzt, um die Dichte aus der Änderung des Drucks zu bestimmen, vgl. Kapitel 3.

2.5 Newtonsche Fluide

Newtonsche Fluide sind Fluide, bei denen die Scherrate $\dot{\gamma}$ und die Schubspannung τ linear zueinander sind. Diese Beziehung lässt sich durch die Scherung eines Fluids zwischen zwei Wänden veranschaulichen (siehe Abbildung 1).

Die Scherrate dieser Abbildung kann mit $\dot{\gamma} = \frac{\partial v_x}{\partial y}$ angegeben werden, weil die Ge-

schwindigkeit \mathbf{v}_x sich nur in Richtung y ändert. Die Scherrate und die Schubspannung hängen proportional mit dem Faktor μ , der dynamischen Viskosität, zusammen. Somit gilt

$$\tau = \mu \dot{\gamma}. \tag{17}$$

Das Newtonsche Materialmodell beschreibt verschiedene Fluide, wie zum Beispiel Luft und Wasser. Damit liefert dieses Modell ein breites Anwendungsspektrum für Simulationen. Für diese Arbeit liefert das Newtonsche Materialmodell die wesentlichen Betrachtungen, die zur Simulation von Wasser notwendig sind.

2.6 Randbedingungen

Eine Strömungssimulation lässt sich in der Regel nicht allein durch die Bilanzgleichungen beschreiben. Häufig werden problemabhängige Rand- und Anfangsbedingungen zum Start der Simulation vorgegeben. Für die Modellbildung ist dies ein wesentlicher Schritt. Anfangsbedingungen werden räumlich für jeden Punkt vorgegeben und gelten für einen Zeitpunkt, welcher den Start der Simulation darstellt. Dagegen gelten Randbedingungen räumlich nur dort, wo Ränder des Simulationsgebietes modelliert sind. Randbedingungen können zeitlich variieren, zum Beispiel die Änderung von Temperaturen (Erwärmung eines Kochtopfes, bevor der Inhalt erwärmt wird).

Üblicherweise werden in der Strömungsmechanik zwei Arten von Randbedingungen verwendet [Spu93]. Weitere Arten existieren, werden jedoch nur für Spezialfälle benötigt. Von den verwendeten ist die 1. Art die Dirichlet Randbedingung. Sie stellt die einfachste Art der Modellierung dar. Dabei wird am Rand direkt ein Wert vorgegeben, welcher über die Zeit variieren kann. Die von Neumann Randbedingung ist die 2. Art. Hierbei wird am Rand die Ableitung (der Gradient) eines Wertes vorgegeben. Damit soll die Änderung eines Wertes an diesem Rand vorgegeben werden. Diese beiden Randbedingungen können auch kombiniert genutzt werden. Die Kombination wird manchmal auch als Randbedingung 3. Art bezeichnet. Für die Lösbarkeit des Strömungsproblems sind die Anfangsbedingungen und Randbedingungen notwendig. Die verschiedenen Arten von Randbedingungen, die für numerische Simulationen verwendet werden, sind in Tabelle 1 aufgeführt.

Tabelle 1: Randbedingungen für Impuls- und Energiegleichung

Randbedingung	Impuls	Energie	Beispiel
Dirichlet RB. 1. Art	$\mathbf{v} = \mathbf{v}_R$	$T = T_R$	isotherme Wand, feste Wand, Periodizität
Neumann RB 2. Art	$\mathbf{t} = \mathbf{t}_R$	$\dot{q} = \dot{q}_R$	adiabate Wand, freie Oberfläche, Wandgleiten
Gemischte RB.	$\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} = 0;$ $\mathbf{t} \times \mathbf{n} = 0$	$\partial T / \partial \mathbf{n} = 0$	Symmetrie
Gemischte RB.	$\mathbf{v} \times \mathbf{n} = 0;$ $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n} = 0$	–	Ausströmrand, Einströmrand

Hierbei sind \mathbf{v} die Geschwindigkeit, T die Temperatur, \mathbf{t} der Spannungstensor und \dot{q} der Wärmestrom. Das Skalarprodukt $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ oder $\mathbf{t} \cdot \mathbf{n}$ ergibt die Geschwindigkeit oder die Spannungen in Normalenrichtung zur Wand. Die Geschwindigkeit oder die Spannungen in Tangentialrichtung zur Wand sind mit $\mathbf{v} \times \mathbf{n}$ oder $\mathbf{t} \times \mathbf{n}$ gegeben.

2.7 Anfangswertprobleme

Die Lösung eines Anfangswertproblems beschreibt das Voranschreiten, zum Beispiel eines Partikels, in der Zeit. Zu einer Startposition, auch Anfangswert genannt, soll die neue Position zum nächsten Zeitschritt ermittelt werden. Dazu muss die zeitliche Ableitung der Position als System von Differentialgleichungen bekannt sein.

Bei der SPH Methode bewegen sich Partikel im Verlauf der Zeit auf einer Bahnkurve, welche Trajektorie genannt wird. In der Regel liegt eine Funktion, welche die Trajektorie beschreibt, während der Berechnung nicht analytisch vor. Bei der SPH Methode wird die Geschwindigkeit ermittelt, welche die zeitliche Ableitung der Trajektorie darstellt. Wird nun die Anfangsposition $x = x_{P1}$ und die zugehörige Geschwindigkeit $v(t)$ eines Partikels betrachtet, so ergibt sich die in Abbildung 2(a) dargestellte Trajektorie $g_{x_{P1}}(t)$. Bei Variation des Anfangswertes $x = x_{P2}$ mit dem selben Geschwindigkeitsfeld ergibt sich die Trajektorie $g_{x_{P2}}(t)$. Es ist zu erkennen, dass die Wahl des Anfangswertes die Lage der Trajektorie bestimmt. Wenn die zeitliche Ableitung der Trajektorie auch von der Position abhängt, ist zusätzlich deren

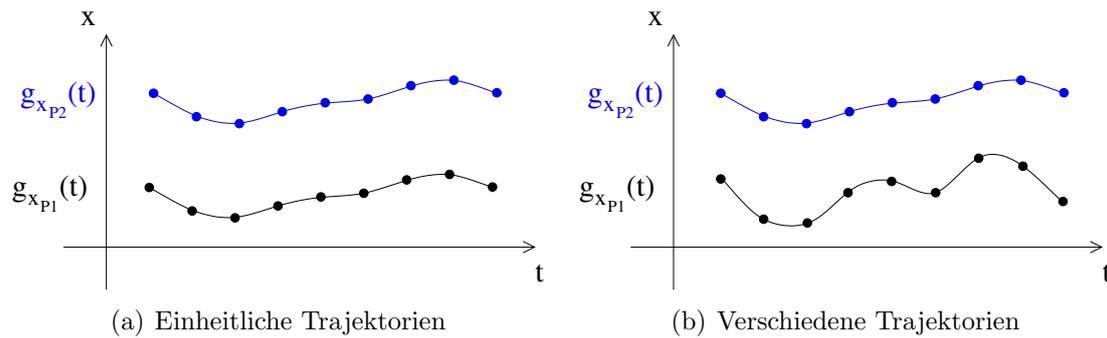


Abb. 2: Darstellung zweier Trajektorien zu einem Anfangswertproblem

Verlauf verschieden, siehe Abbildung 2(b).

Bei einem Anfangswertproblem sind also eine Differentialgleichung und ein Anfangswert gegeben. Zu diesen soll eine differenzierbare Funktion gefunden werden, die den Anfangswert zum Startzeitpunkt annimmt und das Richtungsfeld der Differentialgleichung approximiert. Mit der Lösung des Anfangswertproblems kann das Voranschreiten in der Zeit beschrieben werden. Ein Anfangswertproblem im eindimensionalen Fall hat die Form

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(y(t), t), \quad (18)$$

mit dem Anfangswert $y(t_0) = y_0$ (vgl. [BSMM05]). Dabei ist $y(t)$ die zu ermittelnde Funktion, welche die Position zum Zeitpunkt t bestimmt.

Um ein Anfangswertproblem zu lösen, existieren diverse numerische Verfahren. Dabei wird zwischen expliziten und impliziten Verfahren unterschieden [BSMM05]. Ein explizites Verfahren nutzt nur Werte, die zeitlich vor dem zu berechnenden Wert liegen. Ein implizites Verfahren nutzt bei der Berechnung zusätzlich den zu ermittelnden Wert. Dies kann durch Lösen eines Gleichungssystems erfolgen. Dadurch ist der Aufwand impliziter Verfahren im Allgemeinen größer, jedoch sind meist größere Zeitschritte möglich.

Weiterhin kann auch noch zwischen Ein- und Mehrschrittverfahren unterschieden werden [BSMM05]. Ein Einschrittverfahren nutzt nur den Wert des letzten Zeitschrittes, um den neuen Wert zu berechnen. Ein Mehrschrittverfahren nutzt dagegen auch Werte mehrerer vorangegangener Zeitschritte.

Das explizite Euler-Verfahren ist ein einfaches Einschrittverfahren. Dabei wird für die Bestimmung des Wertes zum nächsten Zeitpunkt die zeitliche Ableitung und der

aktuelle Wert benötigt.

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + \Delta t f(t_i, y(t_i)) \quad (19)$$

Die Differenz zwischen zwei Zeitschritten wird in dieser Arbeit als konstant betrachtet und ist mit $t_{i+1} - t_i = \Delta t$ gegeben. Das Verfahren kann geometrisch über den Anstieg der Funktion oder über eine Taylorreihenentwicklung hergeleitet werden [BSMM05]. Der Konsistenzfehler des expliziten Euler-Verfahrens ist von der Ordnung $O(\Delta t^2)$. Die Konsistenz- und Konvergenzordnung sind somit 1. Damit muss die Zeitschrittweite Δt sehr klein gewählt werden, um mit diesem Verfahren eine hohe Genauigkeit zu erreichen.

Für die Strömungssimulation mit der SPH Methode ist neben dem Ort und der Geschwindigkeit der Partikel auch deren Beschleunigung als Information vorhanden. Dadurch lässt sich das Leapfrog Verfahren nutzen. Dieses ist eine Methode zweiter Ordnung, also genauer als das explizite Euler-Verfahren [You11]. Weiterhin ist es nicht viel aufwändiger, weil die Information der Geschwindigkeit bei der SPH Methode vorliegt, d.h. nicht zusätzlich berechnet werden muss. Für den dreidimensionalen Fall dienen die beiden Gleichungen

$$\mathbf{x}(t_{i+1}) = \mathbf{x}(t_i) + \Delta t \mathbf{v}(t_{i+\frac{1}{2}}) \quad (20a)$$

$$\mathbf{v}(t_{i+\frac{3}{2}}) = \mathbf{v}(t_{i+\frac{1}{2}}) + \Delta t \mathbf{a}(t_{i+1}) \quad (20b)$$

als Beschreibung. Hierbei sind $\mathbf{x}(t)$ die Position, $\mathbf{v}(t)$ die Geschwindigkeit und $\mathbf{a}(t) = \frac{D\mathbf{v}}{Dt}$ die Beschleunigung zum Zeitpunkt t . Das Leapfrog Verfahren wird für die nachfolgenden Rechnungen in Kapitel 7 und 8 genutzt.

3 Smoothed Particle Hydrodynamics Methode

Nach Müller et al. [MCG03] ist die SPH Methode eine Interpolationsmethode für Partikelsysteme. Zuerst wurde die SPH Methode für die Simulation astrophysikalischer Körper von Gingold und Monaghan [GM77] sowie Lucy [Luc77] entwickelt. Inkompressible Strömungen können mit diesem Partikelverfahren simuliert werden [Mon94]. Im folgenden Abschnitt 3.1 wird darauf eingegangen, was bisher in anderen Arbeiten zum Thema SPH untersucht wurde.

Gleichungen der Strömungsmechanik werden gelöst, um eine Strömung zu simulieren und somit technische Probleme zu lösen. Diese benötigen verschiedene physikalische Größen. Bei der SPH Methode sind das die Position, die Geschwindigkeit, die Masse, der Druck und die Dichte, welche von den Partikeln transportiert werden [Ell04].

Die Masse eines Partikels wird bei der Initialisierung festgelegt und ändert sich im Verlauf der Simulation nicht mehr. Damit ist die Massenerhaltung für die SPH Methode durch das Verfahren selbst erfüllt. Die anderen Größen werden ebenfalls initialisiert. Jedoch wird die Strömungssimulation durch ihre Änderung bestimmt, so dass diese zeitlich variieren. Zum Beispiel berechnet sich aus den auftretenden Kräften die Beschleunigung. Aus dieser kann die Geschwindigkeit und daraus wiederum die Position in der Zeit entwickelt werden. So wird die Bewegung der Strömung bestimmt. Die Herleitung der SPH Methode erfolgt in Abschnitt 3.2. Die auftretenden Kräfte werden in Abschnitt 3.3 beschrieben.

Zur Durchführung dieser Arbeit wurde die SPH Methode implementiert. Die dafür genutzten Gleichungen werden in Abschnitt 3.4 als vollständiger Algorithmus vorgestellt.

Die Energiedissipation beschreibt den Übergang von Energie in Wärmeenergie. Sie

kann als Energieverlust durch die Viskosität verstanden werden. Somit eignet sie sich als zur Validierung. Die Gleichungen zur Beschreibung der Energiedissipation sind in Abschnitt 3.5 zu finden.

3.1 Bisherige Arbeiten auf diesem Gebiet

In der Literatur existieren viele verschiedene Ansätze zur Nutzung der SPH Methode. Ursprünglich wurde sie von Lucy [Luc77], sowie Gingold und Monaghan [GM77] entwickelt, um astrophysikalische Körper zu simulieren. Im Laufe der Zeit wurde die SPH Methode um verschiedene Funktionalitäten erweitert, die die Untersuchung weiterer physikalischer Gebiete ermöglichen.

Beschreibt Monaghan [Mon94] eine Erweiterung der SPH Methode, um Strömungen mit freien Oberflächen zu behandeln. Diese Erweiterung bezieht sich auf inkompressible Strömungen. Er berechnet dort als Anwendungsfälle einen Dammbbruch, eine Flutwelle und einen Wellengenerator mit der Bewegung der Wellen zum Strand.

Morris et al. haben in [MFZ97] die SPH Methode erweitert, um inkompressible Strömungen mit niedrigen Reynoldszahlen zu berechnen. Außerdem wird in der Arbeit die Berechnung des Drucks neu modelliert, indem die SPH-Formulierung mit einer quasi-inkompressiblen Zustandsgleichung ersetzt wird. Damit kann die Zeitschrittweite erhöht werden. Das Verfahren wird mit einer Finite-Element-Methode verglichen. Dabei werden gute Ergebnisse für das Geschwindigkeit- und das Druckfeld erreicht. Probleme bereiten gekrümmte Oberflächen, bei denen kleine Fluktuationen des Drucks auftreten. Diese sind nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit und sollen in späteren Arbeiten weiter untersucht und mit einer Erweiterung der Randbehandlung behoben werden.

In der Arbeit [MCG03] von Müller et al. wird die Nutzung der SPH Methode als Simulation für interaktive Anwendungen beschrieben. Dabei handelt es sich um simulierte Strömungen. Das können zum Beispiel realistische Blutströmungen für den medizinischen Bereich sein. Außerdem können ungenauere, jedoch schnellere Simulationen für Computerspiele genutzt werden. Um Interaktivität zu erreichen, werden die durch die Dichte auftretenden Kräfte aus den Navier-Stokes Gleichungen modelliert. Zusätzlich wird ein weiterer Term in der SPH Methode eingeführt, um die Oberflächenspannung zu betrachten. Simulationen mit bis zu 5000 Partikeln können



Abb. 3: Simulation des Füllens eines Glases mit der SPH Methode [MCG03]

so in Echtzeit gerendert werden. Als Anwendungsbeispiel wird ein Glas gezeigt, welches über die Zeit gefüllt wird (siehe Abbildung 3).

Harada et al. beschreiben in [HKK07] eine Beschleunigung der Randbehandlung, um die Rechenzeit der Strömungssimulation zu verkürzen. In Bezug darauf wird eine Beschreibung der Randbehandlung mit Wandpartikeln erläutert. Weiterhin wird erklärt, dass bei dieser Vorgehensweise der Rand nur gut aufgelöst werden kann, wenn viele Wandpartikel genutzt werden, was wiederum die Performanz des Verfahrens beeinträchtigt. Darum wird in der Arbeit [HKK07] eine Abstandsfunktion zur Randmodellierung ermittelt. Von dieser geht eine Kraft aus, die genau wie Wandpartikel auf Fluidpartikel wirken soll. Jedoch soll mit der Abstandsfunktion die Performanz gesteigert werden, weil sie einfacher auszuwerten ist als eine Summe über alle Wandpartikel. Somit ist das Verfahren schneller und der Rand kann mit den einzelnen Flächen besser aufgelöst werden.

Monaghan und Kajtár haben sich mit verschiedenen Randbehandlungen befasst [MK09]. Dabei beschreiben sie die Randbehandlung mit Geisterpartikeln, Wandpartikeln, Randfunktionen und einer Normalisierungsfunktion. Sie diskutieren die Vor- und Nachteile aller Varianten. Geisterpartikel stellen virtuelle Partikel dar, die außerhalb des Fluids positioniert werden, wenn ein Partikel die Nähe eines Randes erreicht. Dann bekommen die Geisterpartikel dem Fluidpartikel entgegengesetzte Kräfte, um das Fluidpartikel vom Rand abzustößen. Ein Problem bei Geisterpartikeln entsteht, wenn eine spitze Oberfläche vorliegt. Dabei besteht die Möglichkeit, dass das Geisterpartikel in das Strömungsgebiet gesetzt wird. Dieses Problem wird in Kapitel 4 veranschaulicht. Der Vorteil von Geisterpartikeln ist, dass mit diesen

eine sehr hohe Genauigkeit erreicht wird [YS07].

Eine andere Formulierung kann mit einer Randfunktion erfolgen. Zum Beispiel führt eine Modellierung einer Randkraft mit dem Lennard-Jones Potential dazu, dass ein problemspezifischer Parameter in den Gleichungen auftritt, der je nach Anwendungsfall angepasst werden muss. In der Arbeit [MK09] wird eine weitere Randkraft vorgeschlagen, die der Formulierung aus [HKK07] ähnelt. Dort werden Wandpartikel mit einer doppelt so feinen Auflösung wie die Fluidpartikel genutzt, um eine Randfunktion zu berechnen. Wandpartikel sind Partikel, die so positioniert werden, dass sie geometrisch eine Begrenzung des Rechengebietes bilden. Bei den Strömungsberechnungen werden sie mit betrachtet. Der Unterschied zu Fluidpartikeln besteht darin, dass sie ihre Position nicht ändern.

In verschiedenen freien Softwarepaketen ist die SPH Methode realisiert. Ein Beispiel ist SPHysics von Gesteira et al. [GGRD⁺10]. Zudem werden verschiedene Kernelfunktionen, die anwendbar sind, darin aufgeführt. Mehrere Möglichkeiten zur Modellierung der Viskosität sind dort angegeben und die Randbehandlung erfolgt dabei durch die Nutzung von Wandpartikeln.

In [IAGT10] beschreiben Ihmsen et al. eine erweiterte Randbehandlung, bei welcher auch der Druck am Rand mit berechnet wird und somit die Gegenkraft der Wand besser wirkt. Weiterhin wird die „predictive-corrective incompressible SPH method“ (PCISPH) genutzt. Damit können größere Zeitschritte als beim Standard SPH angewendet werden. Zusätzlich wird eine Zeitschrittsteuerung eingeführt, deren Vorteil es ist, dass die Zeitschrittweite angepasst werden kann.

López und Roose nutzen einen Verfeinerungsalgorithmus, um die Auflösung der SPH Methode anzupassen [LR11, LRK11]. Die Idee besteht darin, die Gebiete, bei denen eine geringe Geschwindigkeit und somit nur kleine lokale Änderungen auftreten, gröber aufzulösen. Damit kann erreicht werden, dass die Berechnungen minimiert werden, weil in den groben Bereichen die Partikelanzahl geringer ist. Dennoch wird die Genauigkeit der Simulation beibehalten, weil die Auflösung für die geforderte Genauigkeit ausreicht. Bereiche mit großen Änderungen werden detektiert und dort die Auflösung erhöht. Zur Analyse dieser Methode wird der Dammbbruch (siehe Abbildung 4) und ein ins Wasser fallender Tropfen (siehe Abbildung 5) simuliert. Die Betrachtung einer Vergröberung bietet noch viel Potential zur Untersuchung. Diese zusammen mit der Verfeinerung kann eine schnelle und ausreichend genaue SPH Methode ergeben [LR11].

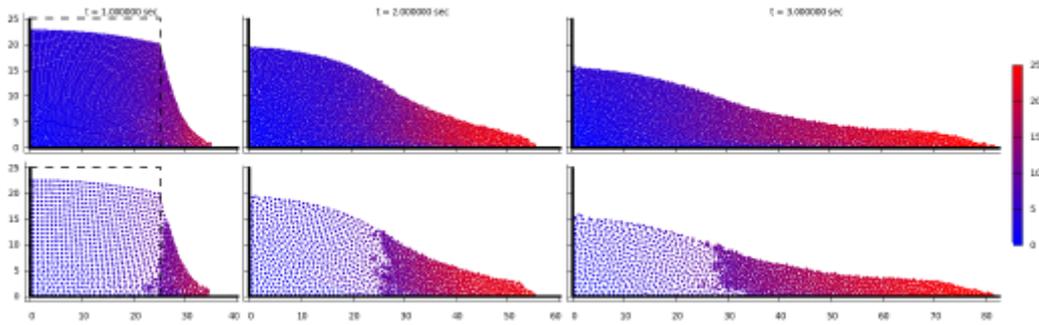


Abb. 4: SPH Simulation eines Dammbbruchs mit Anwendung der lokalen Verfeinerung [LR11]

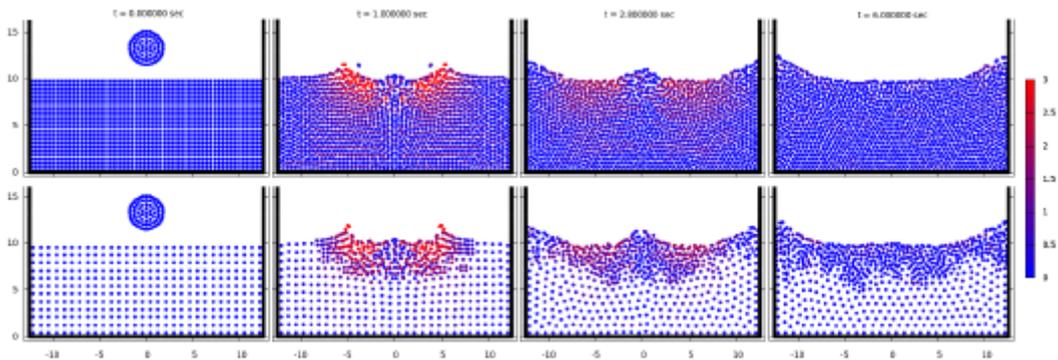


Abb. 5: SPH Simulation eines fallenden Tropfens mit Anwendung der lokalen Verfeinerung [LR11]

Die Arbeit [Mon12] von Monaghan beschäftigt sich mit den verschiedenen Anwendungen der SPH Methode der letzten 17 Jahre. Monaghan stellt fest, dass für die SPH Methode bisherige Randbehandlungen nicht vollständig zufriedenstellend sind. Das Dammbbruchproblem und die Simulation von verschiedenen Medien werden behandelt, welche auch in dieser Arbeit betrachtet werden (siehe Kapitel 8). Weitere Punkte, die in [Mon12] betrachtet werden, sind nichtnewtonsche Fluide, Oberflächenspannung, Diffusion und Turbulenz.

In [BLS12] führen Bodin et al. Nebenbedingungen ein, die die SPH Methode stabilisieren. Diese führen dazu, dass die Berechnungen um bis zu zwei Größenordnungen schneller erfolgen können. Außerdem wird eine bessere Inkompressibilität als bei der Standard SPH Methode erreicht. Dazu wird die SPH Methode mit Zusatzbedingungen mit der Standard SPH Methode verglichen.

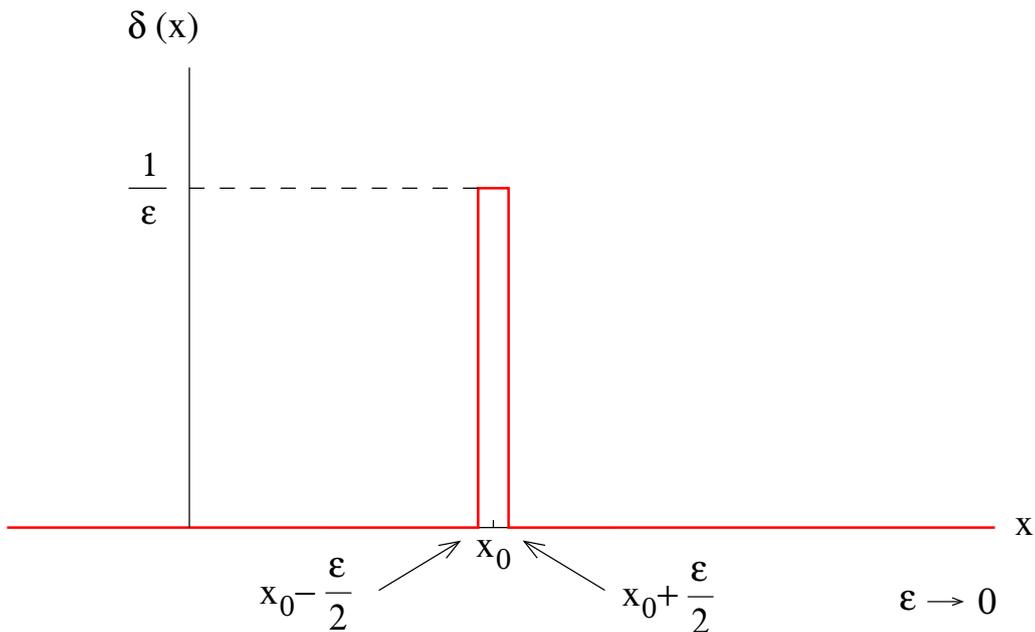


Abb. 6: Approximierte Dirac-Delta-Funktion

3.2 Herleitung der SPH Methode

In diesem Abschnitt werden die mathematischen und strömungsmechanischen Grundlagen der SPH Methode näher betrachtet. Zunächst wird die Herleitung zur allgemeinen Bestimmung einer physikalischen Größe vorgenommen. Dazu wird eine Interpolation genutzt, bei der die Anwendung des Gradienten und des Laplace-Operators analytisch durchgeführt werden kann. Danach werden aus den Navier-Stokes Gleichungen für inkompressible Strömungen [Krö97] die Berechnungen abgeleitet, die für die Simulation mit der SPH Methode notwendig sind.

Um für ein Partikel eine Größe zu bestimmen, wird die Eigenschaft genutzt, dass die SPH Methode eine Interpolationsmethode ist. Eine physikalische Größe $a(\mathbf{x})$ in einem Gebiet Ω kann exakt mit der Gleichung

$$a(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} (a(\hat{\mathbf{x}})\delta(\|\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}\|)) d\hat{\mathbf{x}} \quad (21)$$

wiedergegeben werden [Ell04].

Dabei ist \mathbf{x} die Position, an der die Größe bestimmt werden soll. $\hat{\mathbf{x}}$ stellt die Positionen der Umgebung Ω dar, über welche das Integral ausgewertet wird. In Abbildung 6 wird eine Näherung der Dirac-Delta-Funktion $\delta(\|\mathbf{x}\|)$ dargestellt. Dabei nimmt die

Funktion den Wert $\frac{1}{\epsilon}$ an, falls $x_0 - \frac{\epsilon}{2} \leq x \leq x_0 + \frac{\epsilon}{2}$ gilt. Um die Dirac-Delta-Funktion zu erhalten wird der Grenzwert $\epsilon \rightarrow 0$ gebildet. Es gilt die Bedingung

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\|\mathbf{x}\|) d\mathbf{x} = 1. \quad (22)$$

Aus Gleichung (21) ist zu erkennen, dass die Bestimmung des Wertes für $a(\mathbf{x})$ von der Information $a(\hat{\mathbf{x}})$ und einer Gewichtung durch die Dirac-Delta-Funktion abhängt. Diese nimmt nur an der Stelle $x_0 = 0$ einen Wert an, dessen Integral nach Gleichung (22) genau 1 ist. Dadurch erhält $a(\mathbf{x})$ exakt den Wert, den das Feld an der Position \mathbf{x} besitzt. Damit Partikel aufeinander Einfluss haben, wird für die SPH Methode die Dirac-Delta-Funktion $\delta(\cdot)$ durch eine Kernelfunktion $W(\cdot)$ ersetzt, die eine Annäherung an das Integral darstellen soll. Diese Kernelfunktion muss einen kompakten Träger besitzen und normiert sein. Auf weitere Bedingungen, die die Kernelfunktion erfüllen muss, wird in Kapitel 5 näher eingegangen. Damit wird Gleichung (21) zu

$$a(\mathbf{x}) \approx a_W(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} (a(\hat{\mathbf{x}})W(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}, h)) d\hat{\mathbf{x}}. \quad (23)$$

Im Gegensatz zur Dirac-Delta-Funktion nutzt die Kernelfunktion auch Informationen aus der Umgebung, um einen Wert an einer Auswertestelle zu bestimmen. Damit soll die Interaktion der Partikel untereinander realisiert werden. Weil die Anzahl der zu simulierenden Partikel endlich ist, wird eine Diskretisierung der Gleichung (23) vorgenommen. Dazu wird die Simpsonregel, auch Mittelpunktregel genannt, angewandt (vgl. [Pap09]). Dadurch folgt die Gleichung

$$a_W(\mathbf{x}) \approx a_S = \sum_{i=1}^n (a(\mathbf{x}_i)W(\mathbf{r}, h)V_i). \quad (24)$$

Dabei wird das Volumen V_i der informationsgebenden Partikel $a_i = a(\mathbf{x}_i)$ und der Abstand $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_i$ benötigt. Die Anzahl der Nachbarnpunkte \mathbf{x}_i in einem kugelförmigen Gebiet mit Radius h um den Punkt \mathbf{x} wird mit n bezeichnet. Mit dieser Gleichung erfolgt die Bestimmung einer Größe durch eine Summe über die Nachbarpartikel. Somit werden nur die Informationen benötigt, welche diese Partikel transportieren.

In [MCG03] wird bei der SPH Methode eine skalare Größe a an der Position \mathbf{x} mit

der Gleichung

$$a_S(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \left(m_i \frac{a_i}{\rho_i} W(\mathbf{r}, h) \right) \quad (25)$$

bestimmt. Diese kann aus (24) durch Einsetzen von $V_i = \frac{m_i}{\rho_i}$ erreicht werden. Hierbei wird die Masse eines Partikels x_i mit m_i dargestellt und mit $\rho_i = \rho(x_i)$ die zugehörige Dichte. Weiterhin werden die Informationen a_i der Nachbarpartikel benötigt, um an der Position \mathbf{x} die Interpolation auszuführen.

Der Gradient dieser skalaren Größe wird in einigen Gleichungen benötigt (z.B. Gleichung (42)). Dazu kann der Gradient einfach angegeben werden, indem der Gradient der Kernelfunktion ermittelt wird. Daraus folgt

$$\nabla a_S(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \left(m_i \frac{a_i}{\rho_i} \nabla W(\mathbf{r}, h) \right). \quad (26)$$

Analog gilt für die Bestimmung des Laplace Operators (vgl. Abschnitt 2.1),

$$\nabla^2 a_S(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \left(m_i \frac{a_i}{\rho_i} \nabla^2 W(\mathbf{r}, h) \right). \quad (27)$$

Um die notwendigen Gleichungen für eine Strömungssimulation zu erhalten, werden die strömungsmechanische Betrachtungen aus Abschnitt 2.3 herangezogen.

Die Massenerhaltungsgleichung (10) ist durch die SPH Methode erfüllt, weil die Masse und Anzahl der Partikel konstant ist [MCG03]. Bei inkompressiblen Strömungen ist die Änderung der Dichte $\frac{D\rho}{Dt} = 0$, unter der Voraussetzung keiner wirkenden thermodynamischen Funktion. Damit vereinfacht sich die Massenerhaltungsgleichung (10) zu

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (28)$$

Das bedeutet, dass die Divergenz der Geschwindigkeit in einer inkompressiblen Strömung verschwindet.

Weiterhin tritt in den Bilanzgleichungen die Impulserhaltungsgleichung (14) auf. Die Terme der Impulserhaltungsgleichung stellen die auftretenden Kräfte der Strömung dar. Diese werden als Kräfte pro Masse

$$\frac{\mathbf{F}}{m} = \mathbf{f} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{g} + \Theta \quad (29)$$

angegeben und stehen im Gleichgewicht mit der Änderung des Impulses $\frac{D\mathbf{v}}{Dt}$, also der Trägheit. Damit ergibt sich die Beschleunigung der Partikel

$$\mathbf{a}_i = \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{f}_i. \quad (30)$$

Hierbei sind $\mathbf{f}_i = \mathbf{f}(\mathbf{x}_i)$ die Kräfte pro Masse und $\mathbf{a}_i = \mathbf{a}(x_i)$ die Beschleunigungen, welche an dem Partikel x_i wirken. Aus Gründen der Lesbarkeit wird im Folgenden die Bezeichnung „Kraft“ als Synonym für die massenspezifische Kraft $\mathbf{f} = \frac{\mathbf{F}}{m}$ verwendet. Die Kräfte sind die Druckkraft $f^p = -\frac{1}{\rho}\nabla p$, die Kraft durch Reibungen und Spannungen $f^\mu = \frac{1}{\rho}\mu\nabla^2\mathbf{v}$ und die Gravitation $f^g = \mathbf{g}$, auf welche in Kapitel 3.3 näher eingegangen wird. Diese Kräfte bestimmen die Dynamik der Strömung.

Für die Druckkraft ist der Druck maßgebend. Nach [GGRD⁺10] wird das Fluid bei der SPH Methode als schwach kompressibel behandelt. Für die Berechnung des Drucks wird die Zustandsgleichung (16) genutzt. Diese ist schneller zu berechnen als eine Berechnungsvorschrift, die durch die Herleitung mit Gleichung (25) erfolgt. Somit kann die Performanz gesteigert werden. Das Ziel der SPH Methode ist, die Minimierung der Kompressibilität, damit die Bedingung der Gleichung (28) weiter gilt. Deshalb kann die Gleichung

$$p_i = R(\rho_i - \rho_{ref}) \quad (31)$$

als Berechnungsvorschrift genutzt werden [CBP05]. Hierbei ist p_i der Druck des zu berechnenden Partikels, ρ_i seine eigene Dichte, ρ_{ref} die Referenzdichte und R die zugehörige Gaskonstante. Mit der Gleichung (31) bewirkt die Abweichung der Dichte zu der Referenzdichte eine Druckänderung. Ellero [Ell04] nutzt zur Berechnung des Drucks die leicht angepasste Gleichung

$$p_i = p_{ref} \left(\left(\frac{\rho_i}{\rho_{ref}} \right)^\gamma - 1 \right). \quad (32)$$

Der Referenzdruck ist mit p_{ref} gegeben und der Parameter $\gamma = 7$ wird für die Beschreibung von Wasser genutzt. Auch hier sorgt eine Dichteänderung für eine Druckänderung, welche durch den Parameter γ verstärkt wird. Die Dichteänderung führt bei den Kräfteberechnungen (vgl. Kapitel 3.3) zu einer Gegenkraft, welche der Kompression entgegenwirken soll.

Eine weitere Formulierung des Drucks wurde durch Monaghan [Mon12] vorgenom-

men

$$p_i = \frac{p_{ref} c^2}{\gamma} \left(\left(\frac{\rho_i}{\rho_{ref}} \right)^\gamma - 1 \right). \quad (33)$$

Der Parameter γ ist hier derselbe wie in Gleichung (32) und c steht für die Schallgeschwindigkeit. Bei den Gleichungen für die Druckänderung (31), (32) und (33) ist zu erkennen, dass eine Druckänderung eine Dichteänderung voraussetzt. Somit ist deutlich, dass die SPH Methode nicht vollständig inkompressibel ist. Die Druckkraft ist die antreibende Kraft und wird so modelliert, dass sie der Dichteänderung entgegenwirkt.

Die Dichte muss berechnet werden, weil sie für die Druckgleichung (32) sowie für die Gleichungen einiger Kraftterme notwendig ist. Dafür kann in Gleichung (25) für a die Dichte des Partikels ρ_i eingesetzt werden. Daraus ergibt sich

$$\rho_i = \sum_{j=1}^n \left(m_j \frac{\rho_j}{\rho_j} W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right) = \sum_{j=0}^n (m_j W(\mathbf{r}_{ij}, h)). \quad (34)$$

Dabei ist $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$. Diese Formulierung wird in [MCG03] vorgeschlagen. Monaghan bestimmt in [Mon94] auf gleiche Art und Weise die Dichte, jedoch nutzt er zur Initialisierung die Gleichung

$$\rho_i = \rho_{ref} \left(1 + \frac{\rho_{ref} g (H - y)}{B} \right)^{\frac{1}{y}}. \quad (35)$$

Hierbei sind H die Fluidtiefe, $-y$ die Richtung, in der die Gravitation \mathbf{g} wirkt, und $B = \frac{c}{7\rho}$. Der Vorteil der Gleichungen (34) und (35) liegt in der schnellen Berechnung. Jedoch sind diese Simulationen nicht stabil. Um die Berechnungen zu stabilisieren, kann eine zeitliche Entwicklung der Dichte vorgenommen werden. Die Ermittlung der Dichte erfolgt dann wie in [GGRD⁺10, Mon12] mit der Gleichung

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{j=1}^n (m_j (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h)) \quad (36)$$

erfolgen. Ellero [Ell04] nutzt die Änderung der Dichte. Dazu betrachtet er allerdings die Nachbardichten und erhält die Gleichung

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \rho_i \sum_{j=1}^n \left(\frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right). \quad (37)$$

Die Idee, die eigene Dichte im Verhältnis zur Nachbardichte mit zu betrachten, ist auch dann vorteilhaft, wenn verschiedene Medien untersucht werden oder ein Rand aus Partikeln vorliegt, welche verschiedene Dichte besitzen. In den Berechnungen der Kapitel 7 und 8 wird deshalb Gleichung (37) genutzt, um die Dichte zu bestimmen. Für die Durchführung der zeitlichen Integration ist eine Initialbelegung der Dichte notwendig. Diese wird durch die Dichte des zu repräsentierenden Mediums vorgegeben.

3.3 Modellierung der verschiedenen Kräfte

In diesem Kapitel folgt eine Beschreibung der Kräfte, die aus der Impulserhaltungsgleichung folgen und für eine Beschleunigung der Fluidpartikel sorgen. Mit der durch die Beschleunigung ermittelten Geschwindigkeit erfahren die Fluidpartikel eine Bewegung, welche die Strömung ausmacht.

In Strömungen treten verschiedene Kräfte auf, die auch bei den Berechnungen berücksichtigt werden. Diese Kräfte sind zum Beispiel die Druckkraft, die Scherkraft, die Gravitation, die Oberflächenspannung oder auch externe Kräfte. In der Gleichung (14) wird die Änderung der Geschwindigkeit durch Kräfte beschrieben, die zu einer Beschleunigung in Gleichung (30) führen. Diese und weitere zu betrachtende Kräfte müssen modelliert werden.

In Gleichung (14) wird die Kraft durch den Druck mit $-\frac{1}{\rho}\nabla p$ beschrieben. Dieser Term in die Gleichung (26) eingesetzt, ergibt

$$\mathbf{f}_i^p = -\frac{1}{\rho_i}\nabla p_i = -\frac{1}{\rho_i}\sum_{j=1}^n \left(m_j \frac{p_j}{\rho_j} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right). \quad (38)$$

Diese Kraft ist jedoch nicht symmetrisch. Das bedeutet, dass zwei Fluidpartikel, die sich gegenseitig beeinflussen, mit verschiedenen Kräften aufeinander wirken können. Dies kann zur Folge haben, dass bei den Berechnungen die Erhaltungsgleichungen nicht erfüllt werden. Um die SPH Methode stabiler zu gestalten, muss dieser Term also angepasst werden. Nach Erleben [Erl10] kann der Druckterm entsprechend der Quotientenregel wie folgt umgeformt werden

$$\nabla \left(\frac{p}{\rho} \right) = \left(\frac{\nabla p}{\rho} \right) - \left(\frac{p}{\rho^2} \right) \cdot \nabla \rho. \quad (39)$$

Umstellung nach $-\left(\frac{\nabla p}{\rho}\right)$ ergibt

$$-\left(\frac{\nabla p}{\rho}\right) = -\nabla\left(\frac{p}{\rho}\right) - \left(\frac{p}{\rho^2}\right) \cdot \nabla\rho. \quad (40)$$

Einsetzen von (40) in die Gleichung (26) ergibt

$$-\nabla\left(\frac{p_i}{\rho_i}\right) = \sum_{j=1}^n \left(m_j \frac{p_j}{\rho_j^2} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right) \quad (41a)$$

$$-\left(\frac{p_i}{\rho_i^2}\right) \cdot \nabla\rho_i = \frac{p_i}{\rho_i^2} \sum_{j=1}^n (m_j \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h)). \quad (41b)$$

Zusammen ergeben die Gleichungen (41)

$$\mathbf{f}_i^p = -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i = \sum_{j=1}^n \left(m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right). \quad (42)$$

Diese Gleichung ist in [Erl10, GGRD⁺10] zu finden und wird auch in dieser Arbeit verwendet. Eine Variation von Gleichung (42) findet sich in [HKK07, MCG03]. Hier wird

$$\mathbf{f}_i^p = -\sum_{j=1}^n \left(m_j \frac{p_i + p_j}{2\rho_i\rho_j} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right). \quad (43)$$

verwendet. Neben der Druckkraft wirkt noch die Gravitation $\mathbf{g} = (0, 0, -9, 81)m s^{-2}$.

Für den diffusiven Anteil gibt es drei verschiedene Modellierungen, eine künstliche, eine laminare oder eine vollständige Viskosität (vgl. [GGRD⁺10]). Eine vollständige Viskosität würde turbulente Betrachtungen einschließen. Da nur laminare Strömungen Thema der Arbeit sind, wird auf den turbulenten Anteil im Weiteren nicht eingegangen. Die Viskosität wirkt sich in der Dehnung und der sogenannten Scherkraft aus.

Die künstliche Viskosität wird eingeführt, um die Simulation zu stabilisieren [Kle04]. Zum Beispiel können Verdichtungen oder Stoßfronten dazu führen, dass zwei Partikel sich zu nah kommen und damit zu stark aufeinander wirken. Dabei kann es zu unerwünschten Oszillationen kommen. Diese entstehen, wenn durch die Diskretisierung die räumliche Auflösung der SPH Methode nicht ausreichend ist [Mad08]. Die künstliche Viskosität wirkt gegen diese Effekte, indem sie durch ihre dämpfende Wirkung dafür sorgt, dass Partikel sich nicht zu nah kommen.

Die künstliche Viskosität kann durch Erweitern der Gleichung für die Druckkraft (42) mit einem zusätzlichen Term Π_{ij} erreicht werden [GGRD⁺10]. Daraus ergibt sich

$$\mathbf{f}_i^p = -\frac{1}{\rho_i} \nabla p_i = \sum_{j=1}^n \left(m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right). \quad (44)$$

Der Term für die künstliche Viskosität ist keine Stoffgröße, sondern eine Berechnungsgröße und kann durch die Gleichung

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} \frac{-\alpha c_{ij} \mu_{ij}}{\rho_{ij}}, & (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)(\mathbf{r}_{ij}) \leq 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (45)$$

dargestellt werden [Mon92]. Dabei gilt folgendes

$$\mu_{ij} = \frac{h(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)(\mathbf{r}_{ij})}{\|\mathbf{r}_{ij}\|^2 + \eta^2} \quad (46a)$$

$$c_{ij} = \frac{c_i + c_j}{2} \quad (46b)$$

$$\rho_{ij} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2} \quad (46c)$$

$$\eta^2 = 0,01h^2. \quad (46d)$$

c_{ij} ist die mittlere Schallgeschwindigkeit und ρ_{ij} die mittlere Dichte. Der Parameter α ist eine problemabhängige Größe und muss für die Rechnungen angepasst werden.

In der Gleichung für die Impulserhaltung (14) erzeugt der Term der Viskosität eine zusätzliche Kraft. Zunächst kann der Term $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$ durch Gleichung (27) approximiert werden,

$$\mathbf{f}_i^\mu = \frac{1}{\rho_i} \mu \nabla^2 \mathbf{v}(\mathbf{x}_i) = \mu \sum_{j=1}^n \left(m_j \frac{\mathbf{v}_j}{\rho_i \rho_j} \nabla^2 W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right). \quad (47)$$

Nach [MCG03] erfolgt die Symmetrisierung der Gleichung (47), indem analog zu der Umformung von (38) bis (42) vorgegangen wird (vgl. [Mon12]). Daraus folgt die Gleichung

$$\mathbf{f}_i^\mu = \mu \sum_{j=1}^n \left(m_j \frac{\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i}{\rho_i \rho_j} \nabla^2 W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right). \quad (48)$$

In [GGRD⁺10] wird die Berechnung der Kraft durch die Viskosität $\mu \nabla^2 \mathbf{v}$ mit der

Gleichung

$$\left(\frac{1}{\rho}\mu\nabla^2\mathbf{v}\right)_i = \mathbf{f}_i^\mu = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^n \left(m_j \left(\frac{4\mu\mathbf{r}_{ij}\nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h)}{(\rho_i + \rho_j)\|\mathbf{r}_{ij}\|^2} \right) (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \right) \quad (49)$$

vorgeschlagen. Diese Formulierung wird in den Betrachtungen in den Kapiteln 7 und 8 genutzt.

Zusätzlich zu den bisherigen Kräften können noch weitere Kräfte, wie die Oberflächenspannung, betrachtet werden. In [MFZ97] wird eine Möglichkeit beschrieben, diese Kraft zu berechnen, um die SPH Methode zu stabilisieren. Die Motivation zur Einführung der Oberflächenspannung wird dadurch begründet, dass Partikel am Rand des Fluids weniger Nachbarn besitzen als Partikel innerhalb des Fluids. Diese Eigenschaft führt dazu, dass für die Partikel mit weniger Nachbarn die Berechnungen unausgeglichen sind. Um das auszugleichen, wird die Oberflächenspannung eingeführt und damit die Oberflächenkrümmung minimiert (vgl. Müller et al. [MCG03] und Monaghan [Mon12]).

Als weitere Kraft kann die Interaktion der Partikel mit den Rändern verstanden werden. Ränder stellen Oberflächen von Objekten oder Begrenzungen des Gebietes dar. Diese Betrachtungen werden im Kapitel 4 vorgenommen, in dem verschiedene Ansätze für Randbehandlungen beschrieben werden.

Ein Korrekturterm (XSPH, steht für eXtended Smoothed Particle Hydrodynamics) wird genutzt, um die SPH Methode zu stabilisieren [Ell04, GGRD⁺10].

$$\frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{v}_i + \epsilon \sum_{j=1}^n \left(\frac{m_j}{0,5(\rho_i + \rho_j)} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right) \quad (50)$$

Die Geschwindigkeitskorrektur XSPH aus Gleichung (50) bewirkt, dass bei höheren Geschwindigkeiten Partikel sich nicht zu nahe kommen. XSPH sorgt dafür, dass Partikel eine gemittelte Geschwindigkeit ihrer Umgebung als zusätzlichen Einfluss bekommen. Die Geschwindigkeitskorrektur sorgt somit neben der Viskosität für eine Mittelung der lokalen Geschwindigkeit. Mit der korrigierten Geschwindigkeit kann eine zeitliche Entwicklung der Position vorgenommen werden.

3.4 Algorithmus der SPH Methode

In diesem Abschnitt sollen die für die SPH Methode notwendigen Gleichungen zusammengefasst werden. Dazu werden nur die Gleichungen betrachtet, die auch Anwendung bei den Untersuchungen dieser Arbeit finden.

Aus den Betrachtungen der Abschnitte 3.2 und 3.3 kann mit dem Lösen der folgenden Gleichungen die Simulation einer Strömung erfolgen. Die Gleichung (32) kommt zur Anwendung für die Berechnung des Drucks. Die zeitliche Änderung der Dichte wird mit der Gleichung (37) bestimmt. Die Druckkraft, Gleichung (42), die laminare Viskosität, Gleichung (49) und die Gravitation \mathbf{g} bestimmen die Beschleunigung, Gleichung (30). Mit dieser kann eine zeitliche Integration der Geschwindigkeit durchgeführt werden. Anschließend erfolgt die Geschwindigkeitskorrektur, Gleichung (50). Danach kann mit der Geschwindigkeit die zeitliche Entwicklung der Position ermittelt werden.

Für den Algorithmus müssen die Position, die Dichte, der Druck, die Geschwindigkeit und die Masse aller Partikel initialisiert werden. Die Simulation wird danach für eine vorbestimmte Anzahl von Iterationsschritten durchgeführt. Ein Iterationsschritt repräsentiert das Voranschreiten um Δt in der Zeit. In jeder Iteration werden für jedes Partikel i die Berechnungen aus Tabelle 2 ausgeführt.

3.5 Energiebetrachtung

Zur Analyse der Kernel in Kapitel 8 wird unter anderem die Energiedissipation E_{diss} als Vergleichsgröße genutzt. Diese beschreibt die Umwandlung von Energie in Wärmeenergie. In dieser Arbeit wird für die Berechnungen der SPH Methode die Temperatur des Fluids nicht betrachtet. Jedoch lässt sich die Energiedissipation durch den Einfluss der Viskosität berechnen.

Sie berechnet sich durch die Gleichung

$$E_{diss} = \mu \operatorname{sp}(\mathbf{D}\mathbf{D}^T). \quad (51)$$

Dabei ist μ die dynamische Viskosität und \mathbf{D} der Verzerrungsgeschwindigkeitstensor [Böh00]. Dieser zeigt Verzerrungen in der Strömung an. Das sind Scherung, Dehnung

Tabelle 2: Auszuwertende Gleichungen im SPH Algorithmus

Kraft durch Druck (42)	$\mathbf{f}_i^p = \sum_{j=1}^n \left(m_j \left(\frac{p_j}{\rho_j^2} + \frac{p_i}{\rho_i^2} \right) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right)$
Kraft durch Viskosität (49)	$\mathbf{f}_i^\mu = \frac{1}{\rho_i} \sum_{j=1}^n \left(m_j \left(\frac{4\mu \mathbf{r}_{ij} \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h)}{(\rho_i + \rho_j) \ \mathbf{r}_{ij}\ ^2} \right) (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \right)$
Beschleunigung (30)	$\mathbf{a}_i = \mathbf{f}_i^p + \mathbf{f}_i^\mu + \mathbf{g}$
Zeitl. Entwicklung der Geschwindigkeit (18)	$\frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} = f(\mathbf{v}_i(t), t)$
XSPH (50)	$\mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i + \epsilon \sum_{j=1}^n \left(\frac{m_j}{0,5(\rho_i + \rho_j)} (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right)$
Zeitl. Entwicklung der Position (18)	$\frac{d\mathbf{x}_i(t)}{dt} = f(\mathbf{x}_i(t), t)$
Zeitl. Ableitung der Dichte (37)	$\frac{d\rho_i}{dt} = \rho_i \sum_{j=1}^n \left(\frac{m_j}{\rho_j} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \nabla W(\mathbf{r}_{ij}, h) \right)$
Zeitl. Entwicklung der Dichte (18)	$\frac{d\rho_i(t)}{dt} = f(\rho_i(t), t)$
Druck (32)	$p_i = p_{ref} \left(\left(\frac{\rho_i}{\rho_{ref}} \right)^\gamma - 1 \right)$

und Stauchung. Der Verzerrungsgeschwindigkeitstensor kann durch die Gleichung

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) \quad (52)$$

berechnet werden. Hierbei ist \mathbf{L} der Geschwindigkeitsgradiententensor und stellt die partielle erste Ableitung des Geschwindigkeitsfeldes

$$\mathbf{L} = \nabla \mathbf{v} \quad (53)$$

dar. Das bedeutet, dass \mathbf{L} die räumliche Änderung des Geschwindigkeitsfeldes beschreibt. Somit kann \mathbf{D} durch die Matrixdarstellung

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x_1} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) & \frac{\partial u_2}{\partial x_2} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \right) & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) & \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \end{pmatrix} \quad (54)$$

definiert werden. Der Verzerrungsgeschwindigkeitstensor \mathbf{D} ist ein objektiver Tensor

[Böh00], also invariant bezüglich eines Wechsels des Bezugssystems. Aus diesem Grund kann \mathbf{D} auch im Lagrangeschen Kontext herangezogen werden.

Die Energiedissipation ist Teil der Energiebilanz der Strömung. Diese lässt sich durch die Summe der potentiellen, der kinetischen Energie und der Energiedissipation

$$E = E_{pot} + E_{kin} + E_{diss} \quad (55)$$

mit

$$E_{pot} = m \|\mathbf{g}\| H \quad (56a)$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2} m \|\mathbf{v}\|^2 \quad (56b)$$

ermitteln. Hierbei ist \mathbf{v} die Geschwindigkeit, m die Masse und H die Höhe eines Partikels. Wie oben beschrieben wird die Gravitation durch \mathbf{g} dargestellt.

4 Randbehandlung bei der SPH Methode

Für die SPH Methode gibt es mehrere Möglichkeiten, eine Randbehandlung zu modellieren. So ist es zum Beispiel möglich ein Oberflächennetz zu nutzen, um einen Rand für die Fluidpartikel zu modellieren. Auf diese Möglichkeit wird in Abschnitt 4.1 eingegangen.

Eine andere Möglichkeit zur Modellierung eines Randes mit Wandpartikeln, besteht in der Nutzung von Funktionen. Diese nutzen den Abstand eines Fluidpartikels zu den Wandpartikeln, um eine abstoßende Kraft zu berechnen. Eine Variante ist die Beschreibung durch eine Kraft, die durch das Lennard-Jones Potential wirkt [MST04, RMH⁺97, SZSY11]. Diese Abstandsfunktion erzeugt zu einem Fluidpartikel eine umso größere Gegenkraft, je geringer der Abstand beider zueinander ist. Auf die Modellierung wird im Abschnitt 4.3 näher eingegangen.

Außerdem kann die Randbehandlung mittels Geisterpartikeln erfolgen, siehe Abschnitt 4.4. Geisterpartikel stellen virtuelle Partikel dar. Sie werden nur für den aktuellen Zeitschritt eingeführt und betrachtet, danach werden sie entfernt. Dadurch kann der Speicherbedarf verringert werden. Außerdem kann Rechenzeit gespart werden, weil der Rand nur an den Positionen betrachtet wird, an denen sich Fluidpartikel aufhalten.

4.1 Oberflächennetz

Als Rand kann eine Ebene oder ein Oberflächennetz dienen. Dazu muss detektiert werden, wann ein Fluidpartikel in die Nähe eines Oberflächenelements oder einer Ebene gelangt. Wenn dies auftritt, muss mit den zu nahe kommenden Partikeln eine

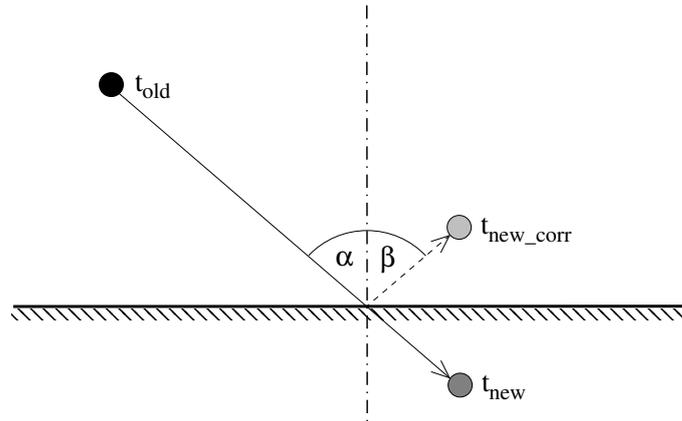


Abb. 7: Elastischer Stoß eines Partikels am Rand

separate Behandlung durchgeführt werden. Dies kann eine Kraft sein, die über den Abstand bestimmt wird, und ähnelt somit der Randbehandlung aus Abschnitt 4.3. Diese Kraft kann im einfachsten Fall als eine Funktion vorgegeben werden [MK09].

Die Modellierung eines undurchdringlichen Randes ist durch ein Oberflächennetz gut zu realisieren. Wenn ein Partikel eine Fläche durchdringt, kann dies erkannt werden, indem ein Schnitt der Fläche mit einem Vektor erfolgt. Dabei ist dieser Vektor die Änderung der Position des Partikels $\mathbf{x}_{new} - \mathbf{x}_{old}$. Der Ortsvektor ist die Position \mathbf{x}_{old} .

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, einen elastischen Stoß des Partikels am Rand zu modellieren. Der elastische Stoß kann mit einer idealisierten Billardkugel veranschaulicht werden, die von einer Wand abgestoßen wird und ihre Geschwindigkeit beibehält. Diese Modellierung realisiert nur einen speziellen Rand, der nicht alle physikalischen Eigenschaften besitzt, die für die Berechnungen dieser Arbeit gewünscht sind. Jedoch verhindert sie, dass Partikel den Rand durchdringen, was für eine Randbehandlung notwendig ist. In Abschnitt 7.2 wird eine Rechnung mit einem elastischen Stoß vorgenommen.

In Abbildung 7 wird der elastische Stoß eines Partikels an einem Rand veranschaulicht. Dabei ist der schwarze Punkt das Fluidpartikel zum alten Zeitschritt t_{old} . Der graue Punkt mit der Bezeichnung t_{new} ist die Position, die für das Partikel durch die zeitliche Integration ermittelt wurde. Nun wird festgestellt, dass das Partikel mit dieser Bewegung den Rand durchdringt. Um dies zu verhindern, wird eine Korrektur durch Spiegelung vorgenommen. Damit erreicht das Fluidpartikel die Position

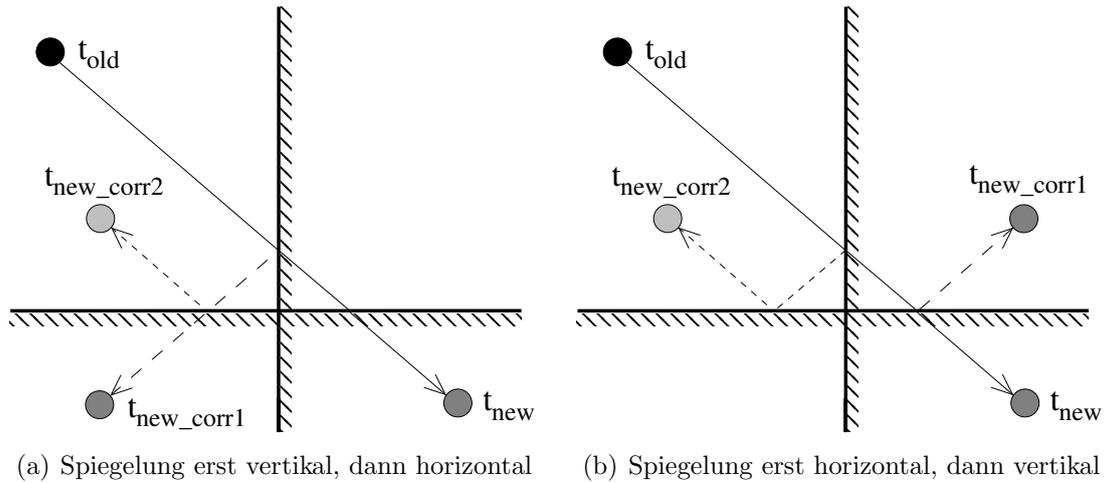


Abb. 8: Elastischer Stoß eines Partikels in einer Ecke

des hellgrauen Punktes t_{new_corr} . Gemäß des Reflexionsgesetzes sind der Einfallswinkel α und der Ausfallwinkel β gleich groß. Weiterhin muss beachtet werden, dass neben der Position auch vektorielle Größen, zum Beispiel die Geschwindigkeit, ihre Richtungen ändern.

Außerdem kann ein Partikel gleichzeitig auch mehrere Ränder durchdringen. Dies führt dazu, dass mehrere Spiegelungen ausgeführt werden müssen. In Abbildung 8 wird dies für eine zweifache Spiegelung dargestellt. Hier ist wiederum der schwarze Punkt t_{old} das Fluidpartikel zum alten Zeitschritt. Der graue Punkt t_{new} ist die neue Position des Fluidpartikel, die wiederum korrigiert werden muss. Die Reihenfolge in der die Ränder gespeichert sind, bestimmt die Reihenfolge der Spiegelung. Diese kann zunächst vertikal und dann horizontal erfolgen, siehe Abbildung 8(a), oder umgekehrt, in Abbildung 8(b) dargestellt. Der Punkt t_{new} wird zur Position t_{new_corr1} korrigiert und danach ein weiteres Mal zur Endposition t_{new_corr2} . Die erreichte Endposition in den beiden Varianten ist dieselbe.

4.2 Wandpartikel

Eine Randbehandlung kann auch durch die Einführung von Wandpartikeln umgesetzt werden. Auf diese Wandpartikel wirken zum Beispiel die Druckkraft und die Scherkraft aus Abschnitt 3.3. Diese Kräfte tragen zu den Berechnungen der Fluidpartikel bei. Dazu werden die genutzten Gleichungen aus Kapitel 3 erweitert und

aus $a(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{\rho_i} a_i W(\mathbf{r}, h)$ wird

$$a(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{m_i}{\rho_i} a_i W(\mathbf{r}, h) \right) + \sum_{i=1}^{n_{neigh}} \left(\frac{m_i}{\rho_i} a_i W(\mathbf{r}, h) \right) \quad (57)$$

Um eine solche Randbehandlung zu ermöglichen, erfolgt die Anwendung der Druck- (32), der Dichte- (37) und der Kräftegleichung (29) für die Wandpartikel [GGRD⁺10]. Dabei kann die Wand mit anderen Werten für die Masse und für die Dichte initialisiert werden, um einen anderen Stoff als das Fluid darzustellen. Weiterhin ist es möglich, die von Wandpartikeln eines Randes auf ein Fluidpartikel wirkende Kraft mit einer Funktion zu interpolieren. Somit können durch Wandpartikel modellierte Ränder in einem vorbereitenden Schritt in Funktionen umgeformt werden. Diese können danach zur schnelleren Berechnung während der Simulation ausgewertet werden [HKK07].

Bei dieser Methode werden die Gleichungen (34) und (32) an den Wandpartikeln ausgewertet. Das bedeutet, dass die Summe der Gleichungen über alle Fluid- und Wandnachbarn erfolgt. Genauso müssen die Wandpartikel bei den Berechnungen der Fluidpartikel berücksichtigt werden. Zusätzlich erfolgt die Betrachtung der Wandpartikel bei den Kräfteberechnungen. Der Vorteil bei dieser Modellierung liegt darin, dass ein Rand mit den Eigenschaften belegt werden kann, die der gewünschten Oberfläche entsprechen. Zum Beispiel kann dem Rand eine Dichte und eine Masse von einem zum Fluid verschiedenen Material zugewiesen werden. Der Nachteil dieser Methode ist, dass die Auflösung des Randes von den Wandpartikeln abhängig ist. Um eine gute Randauflösung hinzubekommen, sind viele Randpartikel notwendig. Dies jedoch führt zu einer längeren Rechenzeit.

In den Arbeiten [HKK07, IAGT10] wird eine Methode vorgeschlagen, den durch die Wandpartikel modellierten Rand durch eine approximierende Funktion zu ersetzen, um die Simulation zu beschleunigen. Dabei nutzen sie die Abstandsfunktion

$$\mathbf{f}_i^p = \frac{l - \|\mathbf{r}_{ij}\|}{(\Delta t)^2}, \quad \text{wenn } \|\mathbf{r}_{ij}\| < l \quad (58)$$

für die Berechnung der Druckkraft. Diese erzeugt eine Gegenkraft, wenn ein Fluidpartikel einen gewissen Mindestabstand $\mathbf{r}_{ij} < l$ zu einem Wandpartikel unterschreitet.

4.3 Lennard-Jones Potential

Die Modellierung einer Kraft durch das Lennard-Jones Potential als Randbehandlung wird von Monaghan in [Mon94] behandelt. Dazu wird eine neue Kraft eingeführt, die von Wandpartikeln auf die Fluidpartikel ausgeübt wird, indem deren Abstand zueinander betrachtet wird. Die Kraft ist eine Abstandsfunktion und geht als zusätzlicher Term bei der Gleichung (29) mit ein. Die Abstandsfunktion besitzt einen problemspezifischen Parameter. Dessen Einstellung sorgt dafür, dass Fluidpartikel nicht den Rand durchdringen und von diesem nicht zu stark abgestoßen werden. Dabei ist es schwierig, ein physikalisches Verhalten zu erreichen. Eine Eichung beziehungsweise eine problemspezifische Anpassung der Koeffizienten ist erforderlich.

Als Gleichung für die Kraft durch das Lennard-Jones Potential wird

$$\mathbf{f}_i^{wall} = d \sum_{j=1}^{n_{neigh}} \left(\left(\frac{r_{ref}}{\|\mathbf{r}_{ij}\|} \right)^{p_1} - \left(\frac{r_{ref}}{\|\mathbf{r}_{ij}\|} \right)^{p_2} \right) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{\|\mathbf{r}_{ij}\|^2} \quad (59)$$

genutzt. Dabei gilt $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$. Die Anzahl der benachbarten Wandpartikel ist durch n_{neigh} gegeben und r_{ref} ist der initiale Partikelabstand.

Die Werte für p_1 und p_2 müssen die Bedingung $p_1 > p_2$ erfüllen und werden als $p_1 = 4$, $p_2 = 2$ oder als $p_1 = 12$, $p_2 = 6$ vorgeschlagen. Der Skalierungsparameter d ist eine problemabhängige Größe und muss für jeden Anwendungsfall neu bestimmt werden. Monaghan gibt zum Beispiel an, dass er $d = \|\mathbf{g}\|H$, $d = 5\|\mathbf{g}\|H$ oder $d = 10\|\mathbf{g}\|H$, mit der Fluidtiefe H und der Gravitation \mathbf{g} nutzt [Mon94]. Mit den Parametern d , h , p_1 und p_2 lässt sich die Kraft des Lennard-Jones Potentials steuern.

In der Abbildung 9 wird die Kraft durch das Lennard-Jones Potential über den Wandabstand aufgetragen. Die Parameter sind $d = 1$, $r_{ref} = 1$, $p_1 = 4$ und $p_2 = 2$. Dabei wächst die Kraft durch das Lennard-Jones Potential mit sinkendem Wandabstand exponentiell an. Wenn ein Fluidpartikel die Nähe der Wand erreicht, dann soll die Gegenkraft ansteigen. Somit zeigt diese Modellierung ein richtiges Verhalten. Jedoch muss darauf geachtet werden, dass ein Fluidpartikel dem Rand nicht zu nahe kommt, denn dadurch kann eine große Gegenkraft erzeugt werden, die zusätzliche Energie hinzufügt und folglich die Strömungssimulation verfälscht.

Weil diese Formulierung der Randbedingung den unerwünschten Aufwand hat, einen Parameter je nach Problemstellung anzupassen, wird dieser Ansatz in dieser Arbeit

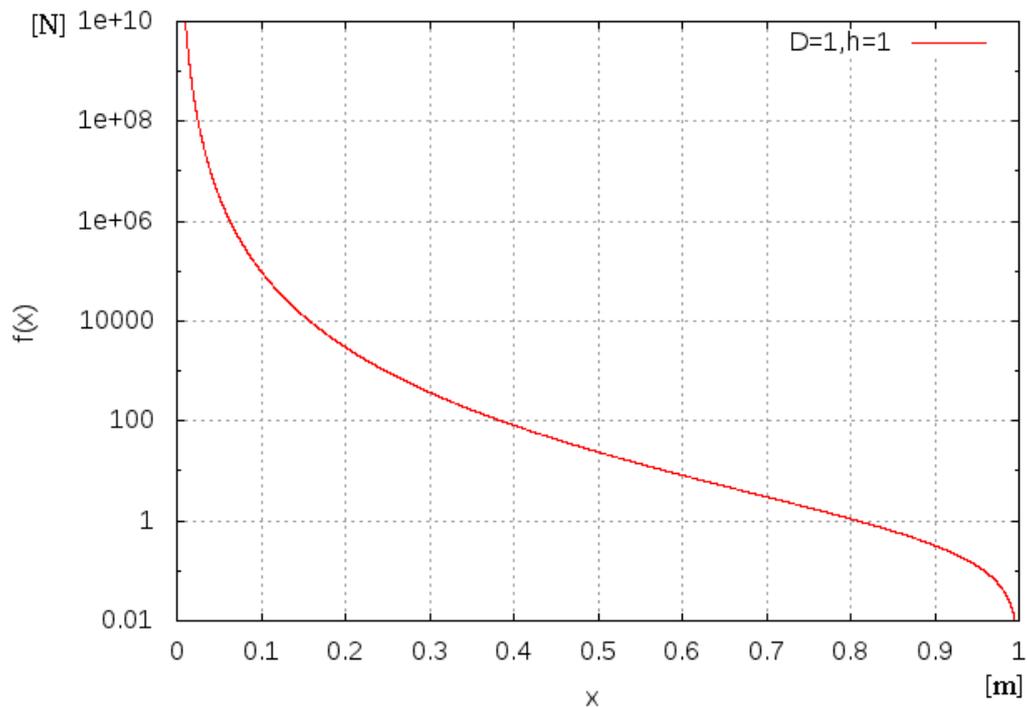


Abb. 9: Die Kraft durch das Lennard-Jones Potential über den Wandabstand aufgetragen

nicht weiter verfolgt.

4.4 Geisterpartikel

Geisterpartikel können als weitere Möglichkeit einer Randbehandlung genutzt werden [YS07]. Diese existieren virtuell und werden nur dann berechnet, wenn ein Fluidpartikel in die Nähe des Randes kommt. Dabei bekommen sie die gleichen Eigenschaften wie das Fluidpartikel, d.h. die gleiche Dichte und die gleiche Masse. Sie bekommen jedoch eine entgegengesetzte Kraft, um das Fluidpartikel von der Wand abzustößen. Mit Geisterpartikeln kann die Oberfläche besser aufgelöst werden als mit Wandpartikeln [YS07]. Abbildung 10(a) stellt die Positionierung eines Geisterpartikels zu einem Fluidpartikel dar. Jedoch besteht die Möglichkeit, dass ein Geisterpartikel ungünstig gesetzt wird, wenn bei der Oberfläche eine starke Richtungsänderung vorliegt (siehe Abbildung 10(b)). Dabei erfolgt eine Positionierung des Geisterpartikels im Simulationsgebiet. Dieses Phänomen kann zu Fehlern in den Berechnungen führen, weil das Geisterpartikel auf alle Partikel seiner Umgebung

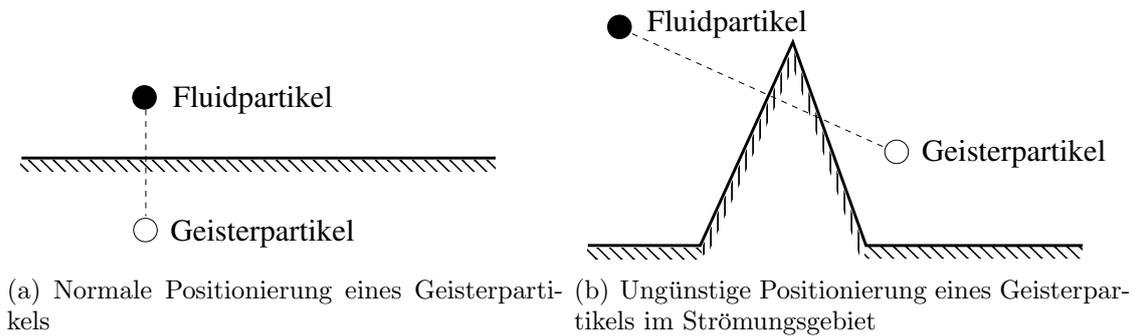


Abb. 10: Positionierung von Geisterpartikeln

wirkt.

Geisterpartikel haben die Aufgabe, dem Fluidpartikel, welches die Nähe der Wand erreicht, entgegenzuwirken. Somit kann eine undurchdringbare Wand modelliert werden. Außerdem existieren die Geisterpartikel nur virtuell. Damit müssen weniger Partikel in den Berechnungen betrachtet werden. Jedoch bedeutet das auch, dass in jedem Zeitschritt Geisterpartikel virtuell erzeugt und entfernt werden müssen.

4.5 Zusammenfassung

Monaghan merkt an, dass bisher noch keine zufriedenstellende Randbehandlung für die SPH Methode besteht [Mon12]. Das liegt an den verschiedenen Nachteilen der einzelnen Verfahren.

Die Kraft durch das Lennard-Jones Potential und auch andere Abstandsfunktionen haben problemabhängige Parameter. Solch eine Anpassung für jeden Anwendungsfall ist unerwünscht, und sie kann unphysikalische Ergebnisse liefern. Obwohl die Modellierung des Randes mit Wandpartikeln durch die Interaktion von Partikeln miteinander ein gutes physikalisches Verhalten liefert, ist nicht garantiert, dass Partikel den Rand nicht durchstoßen. Die Anwendung von Geisterpartikel ist begrenzt, weil sie problematisch bei Rändern mit einer starken Richtungsänderung sind.

Aufgrund der bisher aufgeführten Schwächen der einzelnen Randbehandlungen soll eine Kombination von Oberfläche und Wandpartikeln in Kapitel 7 untersucht werden. Damit sollen die verschiedenen Vorteile beibehalten und die Nachteile ausgeglichen werden.

5 Kernelfunktionen

Die SPH Methode ist ein Interpolationsverfahren, welches für die Interpolation der verschiedenen physikalischen Größen eine Kernelfunktion benötigt. Die SPH Methode kann somit als Kernelmethode bezeichnet werden. Sie nutzt die Kernelfunktionen zur Definition des Partikeleinflussbereiches. Kernelmethoden finden Anwendung in verschiedenen Bereichen, wie zum Beispiel in der Numerischen Analysis, der Mustererkennung [STC04] und dem Maschinellen Lernen [Bis06, SW06].

Wegen der Vielseitigkeit der Kernelmethoden existieren auch diverse Kernelfunktionen in der Literatur. Jedoch sind diese nicht immer direkt anwendbar. Jede Kernelmethode, wie auch die SPH Methode, stellt bestimmte Bedingungen an die Kernelfunktionen. Wenn diese nicht erfüllt sind, kann die Kernelfunktion nicht genutzt werden oder muss zunächst angepasst werden. Auf die Bedingungen, die für die SPH Methode notwendig sind, wird im Abschnitt 5.1 eingegangen.

In den darauf folgenden Abschnitten 5.2, 5.3 und 5.4 werden einige Kernelfunktionen vorgestellt. Diese werden auch für die Betrachtungen in Kapitel 8 genutzt. Da findet die Untersuchung auf Performanz und Genauigkeit statt. Kernelfunktionen sorgen für Stabilität, Genauigkeit und Performanz bei dem SPH Verfahren (vgl. [Aue08, MCG03]).

5.1 Eigenschaften von Kernelfunktionen

Die Dirac-Delta-Funktion $\delta(\cdot)$ der Gleichung (21) wird durch eine Kernelfunktion $W(\mathbf{r}, h)$ ersetzt, um die Gleichung (23) zu erhalten. Diese ist abhängig von einem Abstand $\mathbf{r} = \mathbf{x} - \mathbf{x}_i$ und einem Skalierungsparameter h . Dabei ist \mathbf{x} die Position des aktuell betrachteten Partikels und mit \mathbf{x}_i werden die Positionen Nachbarpartikel beschrieben. Mit dem Skalierungsparameter lässt sich der Einflussbereich der

Kernelfunktion steuern. Die Kernelfunktion, muss folgende Eigenschaften besitzen, damit diese Umformulierung durchgeführt werden darf [SZSY11].

Die Kernelfunktion muss normalisiert sein. Das bedeutet, dass

$$\int_{\Omega} (W(\mathbf{r}, h)) d\mathbf{x} = 1. \quad (60)$$

Diese Normierung sorgt dafür, dass die Auswertung der Gleichung (23) eine Größe der Umgebung liefert.

Weiterhin muss die Kernelfunktion einen kompakten Träger besitzen, also nach einem gewissen Abstand den Wert Null annehmen. Dadurch ist der Einfluss eines Partikels lokal. Somit kann das SPH Verfahren beschleunigt werden, weil Partikel nur mit ihrer Nachbarschaft kommunizieren müssen. Bei den Kernelfunktionen wird häufig die Skalierungsgröße direkt als Einflussradius genutzt, sodass $W(\mathbf{r}, h) = 0$ wenn $\|\mathbf{r}\| \leq h$ gilt.

Eine zusätzliche Bedingung ist, dass die Kernelfunktion für $h \rightarrow 0$ sich wie die Dirac-Delta-Funktion verhält mit $\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r}, h) = \delta(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})$. Zusätzlich muss die Kernelfunktion radialsymmetrisch sein, das bedeutet $W(\mathbf{r}, h) = W(-(\mathbf{r}), h)$.

Außerdem muss $W(\mathbf{r}, h) > 0$ für $\|\mathbf{r}\| < h$ gelten.

Ebenfalls muss sie bei wachsendem Abstand monoton fallend sein. Diese Eigenschaften sind in der Tabelle 3 zusammengetragen.

Tabelle 3: Eigenschaften von Kernelfunktionen für die SPH Methode

Normalisierung	$\int_{\Omega} (W(\mathbf{r}, h)) d\mathbf{x} = 1$	
Kompakter Träger	$W(\mathbf{r}, h) = 0$	wenn $\ \mathbf{r}\ \leq h$
Dirac-Delta-Funktion Ähnlichkeit	$\lim_{h \rightarrow 0} W(\mathbf{r}, h) = \delta(\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})$	
Radialsymmetrie	$W(\mathbf{r}, h) = W(-(\mathbf{r}), h)$	
Positivheit	$W(\mathbf{r}, h) > 0$	für $\ \mathbf{r}\ < h$
Monoton fallend	$W(\mathbf{r}_i, h) < W(\mathbf{r}_j, h)$	für $\mathbf{r}_i > \mathbf{r}_j$

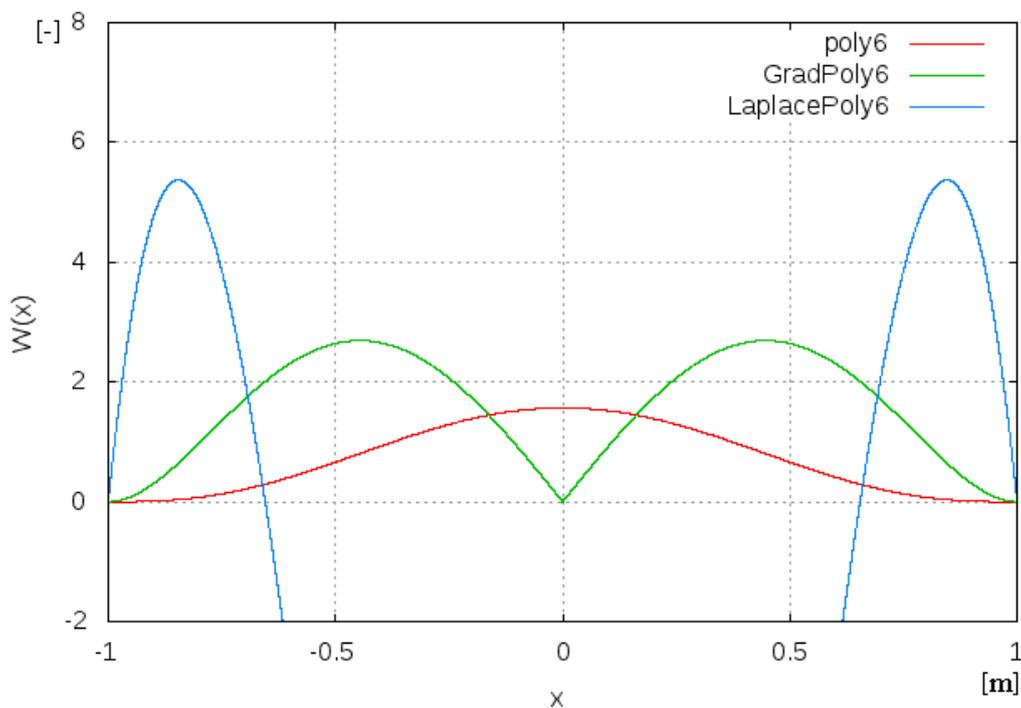


Abb. 11: Darstellung der *poly6*-Kernelfunktion

5.2 *poly6*-Kernelfunktion

Die *poly6*-Kernelfunktion [Aue08, MCG03] wird in der Literatur häufig verwendet und durch folgende Gleichung repräsentiert

$$W_{poly6}(\mathbf{r}, h) = \begin{cases} \frac{315}{64\pi h^9} (h^2 - \|\mathbf{r}\|^2)^3 & 0 \leq \|\mathbf{r}\| \leq h \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (61)$$

Gradient und Laplace von dieser Kernelfunktion sind

$$\nabla W_{poly6}(\mathbf{r}, h) = -\mathbf{r} \frac{945}{32\pi h^9} (h^2 - \|\mathbf{r}\|^2)^2 \quad (62)$$

$$\nabla^2 W_{poly6}(\mathbf{r}, h) = \frac{945}{8\pi h^9} (h^2 - \|\mathbf{r}\|^2) \left(\|\mathbf{r}\|^2 - \frac{3}{4}(h^2 - \|\mathbf{r}\|^2) \right). \quad (63)$$

In der Abbildung 11 ist die *poly6*-Kernelfunktion mit $h = 1$ dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sie ihren größten Wert an der Stelle $\mathbf{r} = 0$ annimmt. Weiterhin ist sie relativ breit und glättet somit die Information der Umgebung.

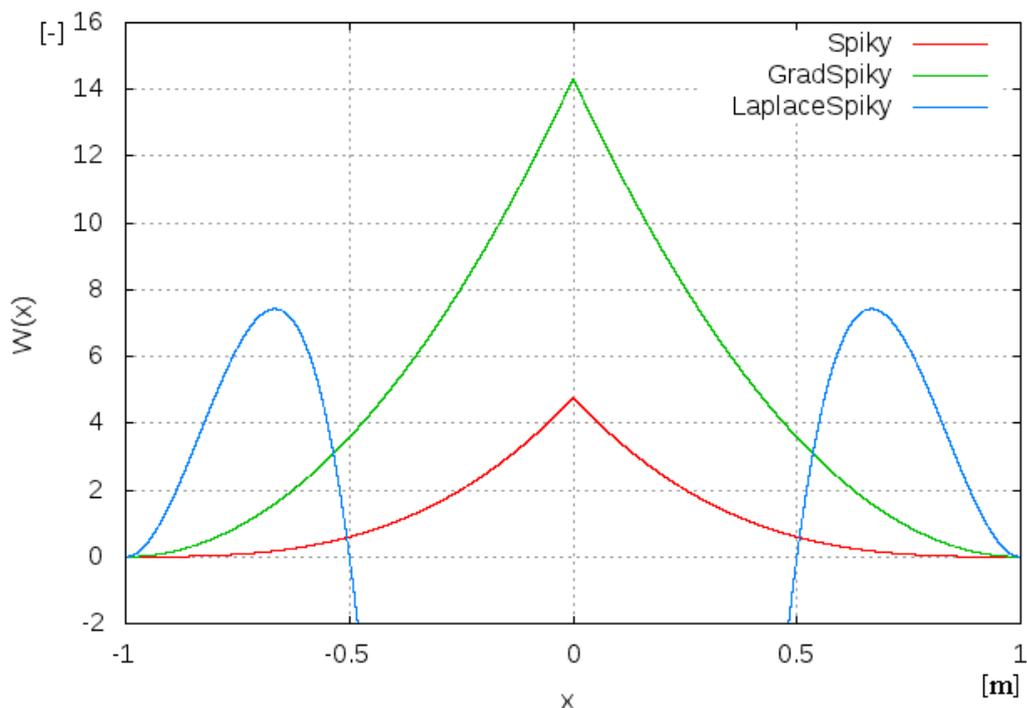


Abb. 12: Darstellung der *spiky*-Kernelfunktion

5.3 *spiky*-Kernelfunktion

Die *spiky*-Kernelfunktion [Aue08, MCG03] findet auch Anwendung bei der SPH Methode und wird mit der Gleichung

$$W_{spiky}(\mathbf{r}, h) = \begin{cases} \frac{15}{\pi h^6} (h - \|\mathbf{r}\|)^3 & 0 \leq \|\mathbf{r}\| \leq h \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (64)$$

dargestellt. Der Gradient und Laplace von dieser Kernelfunktion sind

$$\nabla W_{spiky}(\mathbf{r}, h) = -\mathbf{r} \frac{45}{\pi h^6 \|\mathbf{r}\|} (h - \|\mathbf{r}\|)^2 \quad (65)$$

$$\nabla^2 W_{spiky}(\mathbf{r}, h) = -\frac{90}{\pi h^6} (h - \|\mathbf{r}\|) \left(2 - \frac{h}{\|\mathbf{r}\|} \right). \quad (66)$$

Die *spiky*-Kernelfunktion ist in Abbildung 12 dargestellt, auch hier ist $h = 1$ gewählt. Diese Kernelfunktion ist an der Stelle $\mathbf{r} = 0$ spitz zulaufend, was auch ihren Namen begründet. Im Vergleich zur *poly6*-Kernelfunktion ist diese schmaler. Das bedeutet, dass sie größere Gewichte für die nahen Nachbarpartikel erzeugt.

5.4 C^2 -Kernelfunktion

Andere beliebte Kernelfunktionen sind die von Wendland [Wen96], welche auch für weitere Kernelmethode genutzt werden. Zum Beispiel finden diese Anwendung bei den radialen Basisfunktionen [Wen95]. Bei der SPH Methode werden die Kernelfunktionen von Wendland auch angewandt [MK09, GGRD⁺10]. Sie erfüllen ohne weitere Anpassungen bereits vier von fünf Bedingungen, die in Abschnitt 5.1 gefordert wurden. Zum Beispiel sind die Kernelfunktionen positiv und monoton fallend und haben einen kompakten Träger. Jedoch erfüllen sie nicht die Normalisierungsbedingung von Gleichung (60), daher müssen sie mit einem Koeffizienten erweitert werden [GGRD⁺10]. Eine stabile und allgemein anwendbare Kernelfunktion ist die C^2 -Kernelfunktion von Wendland [Wen05]. Diese muss noch angepasst werden. Daraus folgt

$$W_{C^2}(\mathbf{r}, h) = \begin{cases} \frac{21}{2\pi h^3} \left(1 - \frac{\|\mathbf{r}\|}{h}\right)^4 \left(4\frac{\|\mathbf{r}\|}{h} + 1\right) & 0 \leq \|\mathbf{r}\| \leq h \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}. \quad (67)$$

Der Gradient und Laplace dieser Kernelfunktion sind [Sch09]

$$\nabla W_{C^2}(\mathbf{r}, h) = -\frac{210\mathbf{r}}{\pi h^5} \left(1 - \frac{\|\mathbf{r}\|}{h}\right)^3 \quad (68)$$

$$\nabla^2 W_{C^2}(\mathbf{r}, h) = \frac{210}{\pi h^5} \left(\frac{6\|\mathbf{r}\|}{h} - 3\right) \left(1 - \frac{\|\mathbf{r}\|}{h}\right)^2. \quad (69)$$

Die C^2 -Kernelfunktion ist in Abbildung 13 dargestellt. Zum besseren Vergleich ist auch hier $h = 1$. Die C^2 -Kernelfunktion nimmt auch an der Stelle $\mathbf{r} = 0$ ihren größten Wert an. Außerdem ist sie an dieser Stelle stetig, wie die *poly6*-Kernelfunktion. Weiterhin ist sie nicht so breit wie die *poly6*-Kernelfunktion und nicht so schmal wie die *spiky*-Kernelfunktion.

Die vorgestellten Kernelfunktionen finden Anwendung bei den Simulationen die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt worden sind. Im späteren Verlauf werden diese Simulationen vorgestellt und die Auswirkungen der verschiedenen Kernelfunktionen diskutiert.

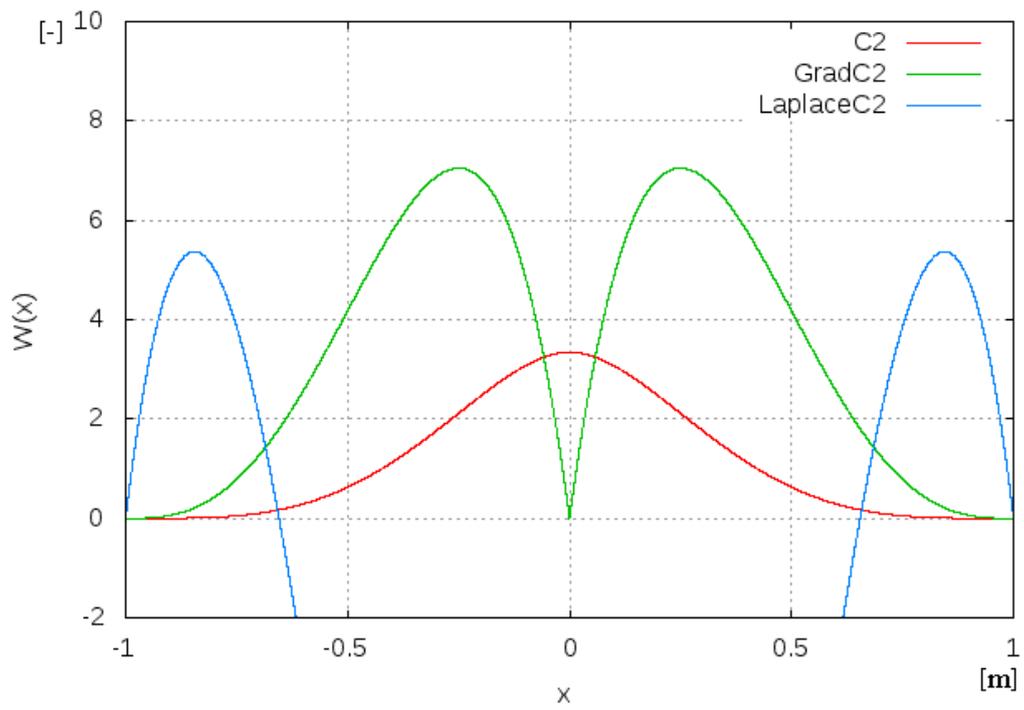


Abb. 13: Darstellung der $C2$ -Kernelfunktion

6 Hintergrundgitter zur Partikelkommunikation

Bei der Strömungssimulation mit der SPH Methode wirken die Partikel aufeinander. Damit diese die dazu notwendigen Informationen austauschen können, müssen sie einander kennen. Weil die Partikelpositionen sich im Verlauf der Simulation ändern, kann nicht einfach die initiale Nachbarschaft beibehalten werden. Sie muss in jedem Schritt neu ermittelt werden.

Eine einfache Suche, bei der jedes Partikel alle anderen als Nachbarn überprüft, führt zu einem Aufwand von $O(n^2)$. Weil die Suche in jedem Schritt ausgeführt werden muss, ist eine Beschleunigung dieser vorteilhaft. Der Aufwand sollte jedoch nicht in der Suche sondern in der Simulation der Physik liegen.

Für die Beschleunigung können Strukturen der Informatik genutzt werden (vgl. [OW12]). Das sind Baumstrukturen oder Hintergrundgitter. Diesen werden Elemente zugeordnet, bei der SPH Methode sind das die Partikel. Um diese zu strukturieren wird eine Unterteilung des Gebietes in Zellen vorgenommen. Bei der Ermittlung der Nachbarschaft können damit viele Elemente ausgeschlossen werden.

Zunächst werden Baumstrukturen vorgestellt, die Lösungen für viele Probleme der Informatik sind. Der folgende Abschnitt 6.1 stellt eine Strukturierung im zweidimensionalen Raum mittels eines Quadtree vor. In dem darauffolgenden Abschnitt 6.2 wird der Octree vorgestellt, welcher analog zum Quadtree Anwendung im dreidimensionalen Raum findet. Ein anderes Vorgehen wird mit dem KD-Tree in Abschnitt 6.3 besprochen. Alle drei Strukturen sind gut geeignet, um ungleichmäßig verteilte Elemente zu ordnen. Für die Suche der Nachbarn für jedes Element haben oben genannte Baumstrukturen den Aufwand $O(n \log(n))$.

Die Strukturierung der Partikel mittels eines gleichverteilten Gitters hat im Gegen-

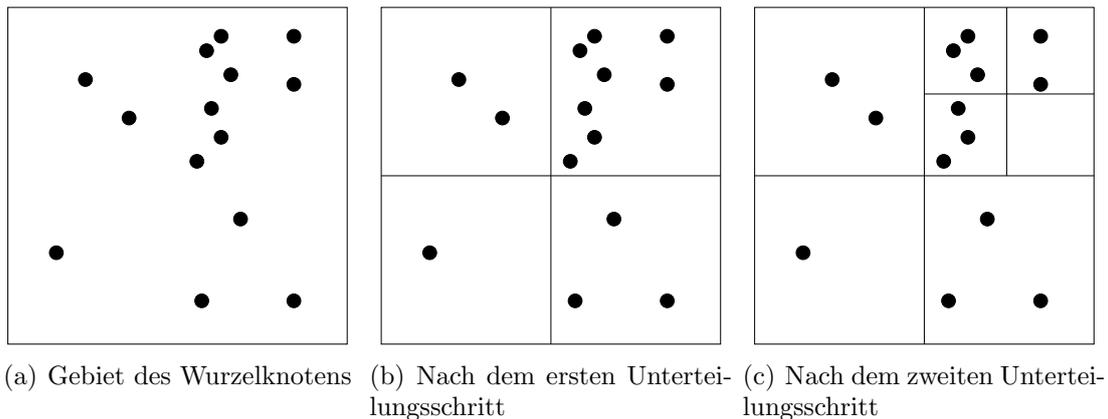


Abb. 14: Unterteilungsschritte eines Quadrees

satz zum Octree und zum KD-Tree den Vorteil, dass sie einmal erstellt nicht in jedem Schritt neu aufgebaut werden muss. Diese Struktur wird in Abschnitt 6.4 vorgestellt.

6.1 Quadtree

In diesem Abschnitt soll der Quadtree vorgestellt werden, um die Nachbarschaftssuche im zweidimensionalen Raum aufzuzeigen. „Quad“ kommt aus dem Lateinischen und steht für die Ziffer Vier. Der zweite Wortteil „Tree“ entspringt dem Englischen und bedeutet Baum. Ein Quadtree ist eine Baumstruktur der Informatik, die zur Strukturierung zweidimensionaler Daten genutzt wird.

Anhand der Abbildung 14 soll der Quadtree erläutert werden. Oft wird er am kartesischen Koordinatensystem ausgerichtet. Um Zugriff auf die Baumstruktur zu erhalten, wird ein Startknoten, auch Wurzel genannt, definiert. Dieser Knoten beschreibt das zu untersuchende Gebiet. Ihm werden die zu strukturierenden Elemente zunächst zugeordnet (siehe Abbildung 14(a)).

Ein Knoten wird in vier Kinderknoten unterteilt, wenn er mehr als eine zuvor definierte Anzahl an Elementen enthält. Diese Anzahl beträgt drei beim Beispiel von Abbildung 14. Die Unterteilung erfolgt durch zwei Geraden, wobei die Gebiete der entstehenden Kinderknoten gleich groß sind (siehe Abbildung 14(b)). Diese bekommen danach die Elemente zugeordnet, die in ihrem Gebiet liegen. Das Verfahren wird so lange fortgesetzt, bis jeder Knoten genau die festgelegte Anzahl oder weniger Ele-

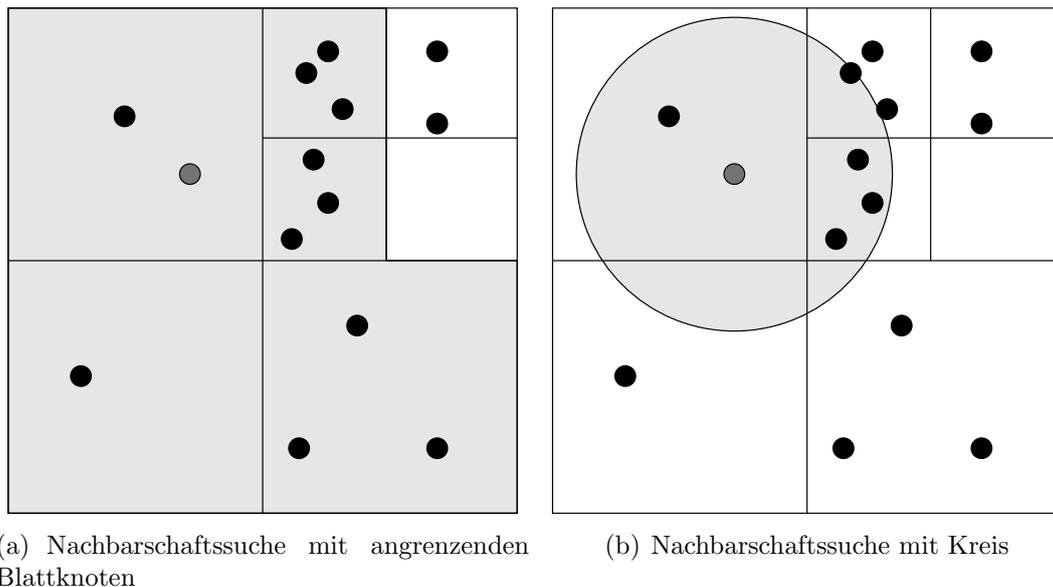


Abb. 15: Nachbarschaftssuche zu einem ausgewählten Element, dunkelgrau markiert, in einem Quadtree

mente beinhaltet. In Abbildung 14(c) ist der abgeschlossene Vorgang dargestellt.

Es ergeben sich für die Unterteilung des Baums nach dem Wurzelement zwei verschiedene Arten von Knoten, die im Baum auftreten können. Einerseits entstehen Knotenelemente, die immer weiter unterteilt werden, und andererseits die Endknoten oder auch Blattknoten genannt, denen die Daten zugeordnet werden, und bei denen keine weitere Unterteilung stattfindet.

Jede Nachbarschaftssuche in einem Quadtree ermittelt die Nachbarn eines Elementes. Die Suche kann erfolgen, indem jedes Blatt eine Liste von seinen Nachbarblättern bekommt. Es handelt sich dabei um die Blätter, die das Blatt, in dem das Element sich befindet, berühren (siehe Abbildung 15(a)). Das zu untersuchende Element ist in der Abbildung grau hervorgehoben. Bei diesem Verfahren werden auch Elemente als Nachbarn ermittelt, die nicht im Einflussbereich des untersuchten Elementes liegen.

Die Nachbarschaft zu einem Element kann auch anders bestimmt werden (siehe Abbildung 15(b)). Dazu wird um dessen Position ein Kreis definiert, der im Quadtree vom Wurzelknoten bis hin zu den Blattknoten weitergereicht wird. Dazu kontrolliert jeder Knoten, ob der Kreis einen Teil seines Gebietes abdeckt. Ist dies der Fall, reicht der Knoten den Kreis an seine Kinderknoten weiter. Wenn der Kreis bei einem Blattknoten angekommen ist, reicht dieser die Elemente zurück, die innerhalb des

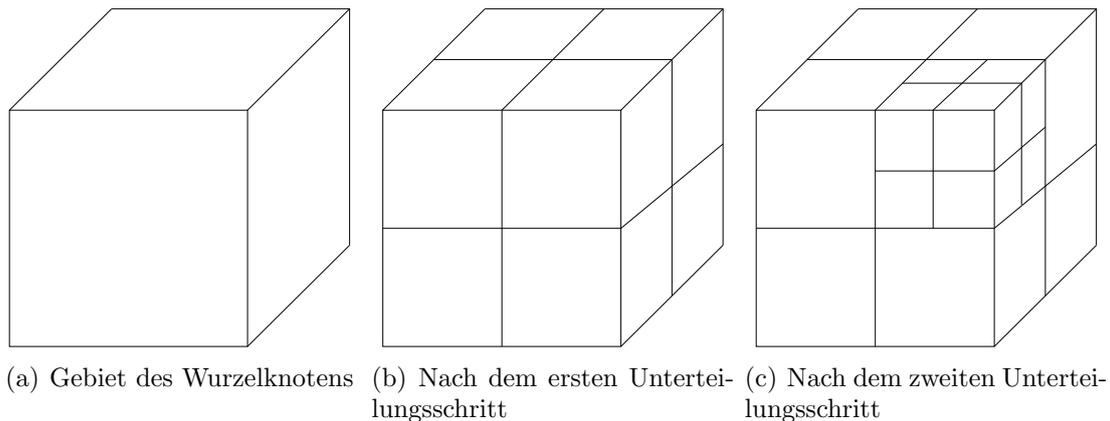


Abb. 16: Unterteilungsschritte eines Octree

Kreises liegen. Diese Strategie ist etwas komplexer, jedoch genauer, weil der Abstand der Elemente als Kriterium relevant ist. Außerdem wirkt sich dies auch auf die Rechenzeit aus, weil weniger Nachbarpunkte zur Berechnung beitragen.

6.2 Octree

In der Informatik gibt es als Baumstruktur neben dem Quadtree die Datenstruktur Octree. „Oct“ kommt aus dem Lateinischen und steht für die Ziffer Acht. So wie der Quadtree den zweidimensionalen Raum unterteilt, kann der Octree für den dreidimensionalen Raum genutzt werden (vgl. [Kün09]).

Der Aufbau des Octrees wird anhand der Abbildung 16 erläutert. Jeder Octree beginnt mit einem Wurzelknoten. Dieser stellt den Einstiegspunkt in die Struktur dar, siehe 16(a), und umfasst den zu untersuchenden Bereich. Analog zum Quadtree erfolgt eine Unterteilung in Kinderknoten, wenn eine genügend große Anzahl von Elementen in diesem Bereich enthalten sind. Andernfalls endet die Unterteilung für diesen Knoten.

Bei der Unterteilung eines Knotens entstehen stets exakt acht Kindknoten, siehe Abbildung 16(b). Nach einer Unterteilung werden erneut alle Bereiche auf die Anzahl ihrer enthaltenen Elemente kontrolliert. Für den Fall, dass in einem Bereich noch mehr Elemente als gewünscht enthalten sind, wird nach obigen Verfahren eine erneute Unterteilung vorgenommen, wie zum Beispiel in Abbildung 16(c). Dort wird von der vorderen Hälfte des Gesamtvolumens der rechts oben liegende Kubus weiter

unterteilt. Es wäre ebenso möglich, noch andere dieser Bereiche weiter zu verfeinern, bis die erforderliche Strukturierung abgeschlossen ist.

Der Bereich, der vom Wurzelknoten repräsentiert wird, ist im Normalfall am kartesischen Koordinatensystem ausgerichtet. Daher kann die Unterteilung des Raumes immer mit drei Ebenen erfolgen, die parallel zu den durch die Koordinatenachsen aufgespannten Ebenen liegen. Es entstehen somit bei jeder Unterteilung acht gleich große Bereiche.

Die Nachbarschaftssuche beim Octree erfolgt wie beim Quadtree, siehe Abschnitt 6.1. Dazu können einerseits die Nachbarknoten betrachtet werden, andererseits kann eine Kugel, analog zu dem Kreis beim Quadtree, definiert werden, die von den Baumknoten weitergereicht wird.

Vorteilhaft an dieser Suchstruktur ist die Möglichkeit der einfachen Umsetzung. Aufgrund der Unterteilung der Bereiche ohne Berücksichtigung der Lage der Daten kommt es oft zu ungleichmäßigen Füllungen der Blattknoten. Diese Unausgewogenheit kann zu Ungenauigkeiten führen, da in manchen Bereichen zu wenig Elemente für das Verfahren, welches die Struktur nutzt, zur Verfügung stehen können. In anderen Bereichen kann der entgegengesetzte Fall auftreten, dass zu viele Elemente detektiert werden. Der Rechenaufwand steigt erheblich an, wenn dem Verfahren zu viele Nachbarelemente zur Verfügung stehen. Es können jedoch auch leere Blätter entstehen. Bei der Implementierung des Baumes muss darauf geachtet werden, dass das Verfahren, welches den Octree als Suchstruktur nutzt, auch mit leeren Blättern umgehen kann.

Viele Verfahren benötigen eine Mindestanzahl von Elementen, um eine gewisse Genauigkeit zu erreichen. Generell gilt, dass sich die Gesamtgenauigkeit am größten Fehler orientiert. Somit ist eine bessere Auflösung in einigen Bereichen kein Vorteil, da nur der Rechenaufwand gesteigert wird. Der allgemeine Aufwand des Zugriffs auf die Informationen der Elemente in einem Octree liegt bei $O(n \log(n))$.

6.3 KD-Tree

Ein KD-Tree, oder KD-Baum, ist eine Spezialisierung eines BSP (binary space partitioning) Baumes. KD steht für k-dimensional. Dieser wurde 1975 von J. L. Bentley vorgestellt [Ben75]. Mit dem BSP Baum kann die Strukturierung eines beliebig di-

mensionalen Raumes vorgenommen werden. Der BSP Baum separiert mit einer Hyperebene (in 3D eine Ebene) bei jeder Teilung den Raum in zwei Unterräume, die in dem vorangegangenen Baum als zwei Teilbäume gespeichert werden. Diese Teilung wird rekursiv fortgesetzt, bis ein Teilbaum ein Abbruchkriterium erfüllt. Dieses Kriterium kann eine vorgegebene Menge an Elementen pro Teilbaum sein. Beim BSP Baum liegt die Ebene beliebig im Raum. Der KD-Baum unterscheidet sich dadurch, dass die Teilungsebene parallel zu der Ebene liegt, die von zwei Koordinatenachsen aufgespannt wird. Das kann in der Programmierung genutzt werden, weil nur die Dimension, in der der Raum geteilt wird, und die Position dieser Teilungsebene in dieser Dimension benötigt werden, um die Elemente den neuen Teilräumen eindeutig zuzuordnen.

Die Unterteilung in Teilräume kann mit unterschiedlichen Strategien vorgenommen werden. Zunächst muss die Dimension gewählt werden, in der geteilt wird. Dazu kann in jedem Schritt eine Rotation der Dimensionen erfolgen, die Dimension mit der größten Ausdehnung ausgewählt werden oder die Dimension, in der die Elemente die größte Ausdehnung hat, wird genutzt. Für den zweidimensionalen Fall sind diese Möglichkeiten in Abbildung 17 dargestellt. Die letzte Möglichkeit ist zwar komplexer bei der Detektierung, jedoch besitzt sie den Vorteil, dass sie die Verteilung der Daten berücksichtigt. Dies liefert im allgemeinen bessere Ergebnisse.

Bei einer Verteilung der Elemente in einer Ebene oder auf einer Geraden, tritt bei der Teilung durch Rotation der Dimensionsgröße sowie mit der Dimensionsgröße als Teilungskriterium ein Problem auf. Die Elemente können dabei alle in der Teilungsebene liegen. Das führt dazu, dass einer der Teilbäume leer ist und der andere alle Elemente enthält. Somit ist eine Unterteilung vorgenommen, die keine weitere Strukturierung der Daten liefert. Dies benötigt zusätzlichen Speicher und Rechenzeit.

Weiterhin muss nun festgelegt werden, wie in der ausgewählten Dimension die Teilungsebene gelegt werden soll. Erstens kann so geteilt werden, dass der Raum halbiert wird und somit zwei gleich große Teilräume entstehen. Zweitens kann die Verteilung der Elemente betrachtet werden. Zu dieser Verteilung wird die Teilungsebene mittig gelegt. Drittens kann die Teilungsebene so positioniert werden, dass jeweils die Hälfte der Elemente in den neuen Teilräumen liegt. Wenn die Ausdehnung des Raumes oder der Elemente als Teilungskriterium gewählt wird, dann führt dies zu einem nicht ausbalanciertem KD-Baum. Dabei können Blätter mit unterschiedlicher

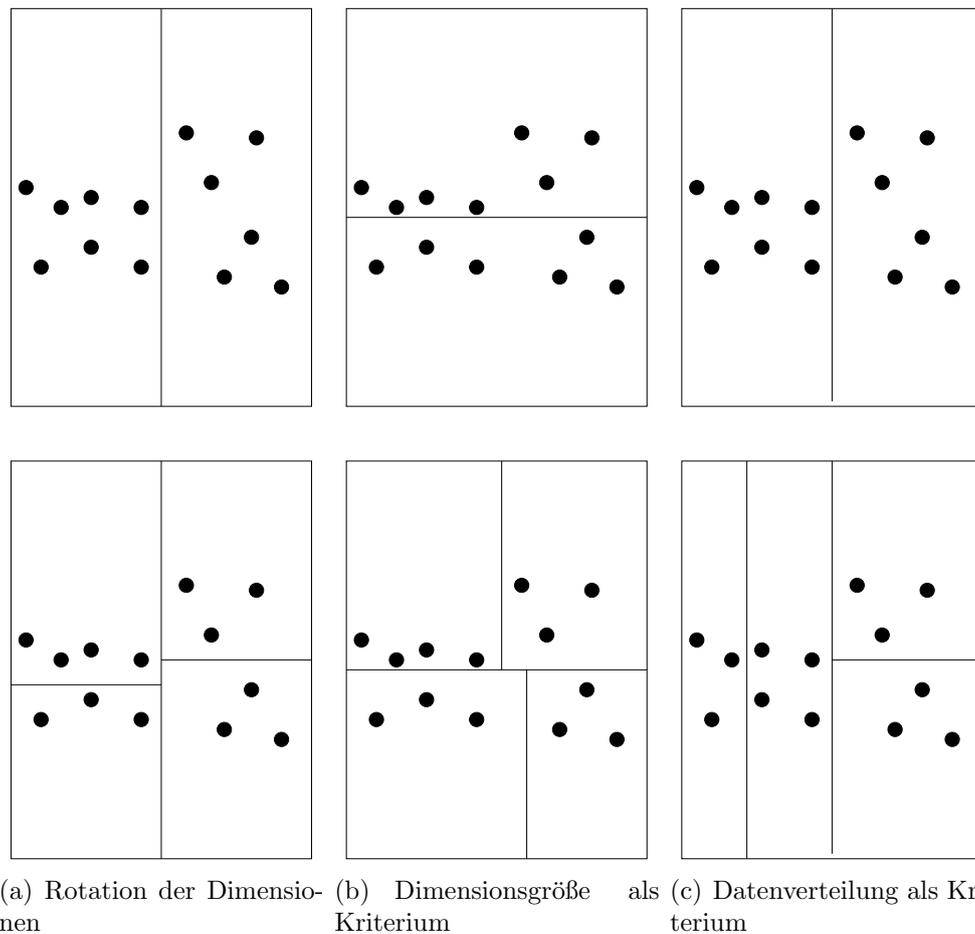


Abb. 17: Unterteilung eines KD-Trees (2D)

Anzahl von Elementen entstehen. Dagegen besteht der Vorteil, dass nur kleine Zellen dort entstehen, wo sich die zu sortierenden Elemente häufen. Bei der Strategie, immer gleich viele Elemente in den Teilbäumen zu erhalten, besteht der Vorteil darin, dass ein ausgeglichener KD-Baum entsteht, d.h. die Blätter sind alle gleich tief im Baum einsortiert. Ein ausgeglichener Baum sorgt dafür, dass bei einer Suche in diesem, die Abfragen minimiert werden. Der Nachteil dabei ist, dass langgestreckte Zellen (vgl. [Moo91]) entstehen können (siehe Abbildung 17(c)).

Für die Nachbarschaftssuche in einem vorhandenen KD-Baum existieren die gleichen Möglichkeiten wie bei Quadtree (siehe Kapitel 6.1). Jedem Blatt eines KD-Baumes kann eine Liste mit Nachbarblättern zugeordnet werden. Weiterhin kann eine Nachbarschaftssuche durchgeführt werden, indem ein Kreis um das betrachtete Element definiert wird. Dieser wird ausgehend von dem Wurzelknoten des KD-Baumes an die Kinderknoten weitergereicht. Jeder Knoten überprüft, ob der Kreis sein zugehöriges

Gebiet berührt. Ist dies der Fall, dann wird das Element an die Teilbäume weitergereicht. Die Blätter des Baumes führen die gleiche Kontrolle durch. Jedoch geben diese ihre gespeicherten Elemente zurück, anstatt den Kreis weiterzureichen.

Der Vorteil eines KD-Baumes ist, dass er sich den Daten anpasst. Das bedeutet, dass nach der Aufteilung des Raumes jedes Blatt des KD-Baumes eine maximale Anzahl von Elementen beinhaltet (siehe Abbildung 17). Dies ist vorteilhaft, wenn nur eine bestimmte Anzahl von Nachbarn notwendig ist, um eine geforderte Genauigkeit zu erreichen. Der allgemeine Aufwand des Zugriffs auf die Informationen der Elemente in einem KD-Baumes liegt bei $O(n \log(n))$ [Pfa04].

Der Aufbau des KD-Baumes ist aufwändig. Dies ist unproblematisch, wenn die Positionen der zu untersuchenden Elemente fest sind. Da jedoch Partikelverfahren mit beweglichen Partikeln arbeiten, ist der KD-Baum nur begrenzt einsetzbar.

6.4 Gleichverteilung

Eine Strukturierung einer Gleichverteilung ist eine einfach zu implementierende Variante eines Hintergrundgitters. Sie ist keine Baumstruktur, da sie keine Hierarchie besitzt. Das Rechengebiet wird in Zellen mit einer fest definierten Größe unterteilt. Damit ist eine Nachbarschaftssuche nicht notwendig. Um zu einem Element die Nachbarelemente zu erhalten, werden die Zelle, in dem sich das Element befindet, und die daran angrenzenden Zellen genutzt. Dazu wird die Zellgröße so gewählt, dass sie dem Einflussbereich eines Elements entspricht.

Die Gleichverteilung muss im Gegensatz zum Octree und KD-Tree nicht erneut aufgebaut werden, wenn sich die Verteilung der Elemente ändert. Diese müssen bei einer Positionsänderung lediglich in die neuen Zellen einsortiert werden. Der Nachteil dieses Verfahrens liegt darin, dass die Anzahl der Elemente pro Zelle nicht direkt gesteuert werden kann. Das bedeutet, dass Zellen ohne, sowie Zellen mit vielen Elementen auftreten können. Mit dem Aufwand des Zugriffs auf die Informationen der Elemente von $O(n)$ ist die Gleichverteilung schneller als der Octree und der KD-Tree.

6.5 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wird die Gleichverteilung genutzt. Sie ist für die Verteilung der Partikel der SPH Methode geeignet, weil in dieser Arbeit die Partikel gleich groß sind. Damit ist die Anzahl der Partikel pro Zelle durch die Zellgröße gegeben. Die Zellgröße kann außerdem so gewählt werden, dass sie zu dem Einflussbereich der Partikel passt. Damit kann die Nachbarschaftssuche schnell erfolgen, weil zu einer Zelle alle Nachbarzellen vorhanden sind und die darin enthaltenen Partikel sind die Nachbarn. Die Partikel ändern bei der Simulation mit der SPH Methode ihre Positionen. Der Octree und der KD-Tree müssen in jedem Schritt neu aufgebaut werden, um die Positionsänderung zu betrachten. Dies ist bei der Gleichverteilung nicht notwendig, dies bringt eine zusätzliche Steigerung der Performanz.

7 SPH Simulationen zur Analyse verschiedener Randbehandlungen

In diesem Kapitel wird eine Konfiguration mit mehreren Randbehandlungen betrachtet. Das Ziel ist die Ermittlung einer Randbehandlung, die ausreichend stabil ist, um die Kernelanalyse im Kapitel 8 durchführen zu können. Stabil bedeutet in diesem Zusammenhang, dass der Rand keine zusätzliche Energie erzeugt, beziehungsweise keine Energie verliert, und dafür sorgt, dass alle Fluidartikel im Simulationsgebiet bleiben. Die hierfür genutzte Startkonfiguration wird in Abschnitt 7.1 vorgestellt. Der elastische Stoß als Randbehandlung mit einer Oberfläche wird in Abschnitt 7.2 behandelt. Abschnitt 7.3 zeigt drei Varianten der Randbehandlung mit Wandpartikeln. Eine Kombination von Wandpartikeln mit elastischem Stoß wird in 7.4 vorgestellt. In allen Betrachtungen dieses Kapitels wird der Algorithmus aus Tabelle 2 und die C^2 -Kernelfunktion (vgl. Kapitel 5) genutzt. Weiterhin ist der Einflussradius auf $h = 0,45$ gesetzt, damit beim Partikelabstand vom $\mathbf{r}_{ij} = 0,02$ genug Nachbarpartikel Einfluss auf das jeweilig betrachtete Fluidpartikel besitzen. Beim XSPH wird $\epsilon = 0,1$ gesetzt. Die Beschriftungen der folgenden Abbildungen sind in der englischen Sprache, weil diese für spätere wissenschaftliche Publikationen weiterverwendet werden sollen.

7.1 Startkonfiguration für die Randanalyse

In diesem Abschnitt wird die Startkonfiguration (siehe Abbildung 18) für die Randanalyse vorgestellt. Dort und in den folgenden Strömungsabbildungen entspricht die Farbkodierung der Partikel den zugehörigen Druckwert. Um die Rechenzeit gering zu halten, werden bei den Berechnungen für die Randanalyse eine geringe Anzahl, aber ausreichend Partikel genutzt. Daher werden $25 \cdot 25 \cdot 25 = 15.625$ Fluidpartikel gleicher

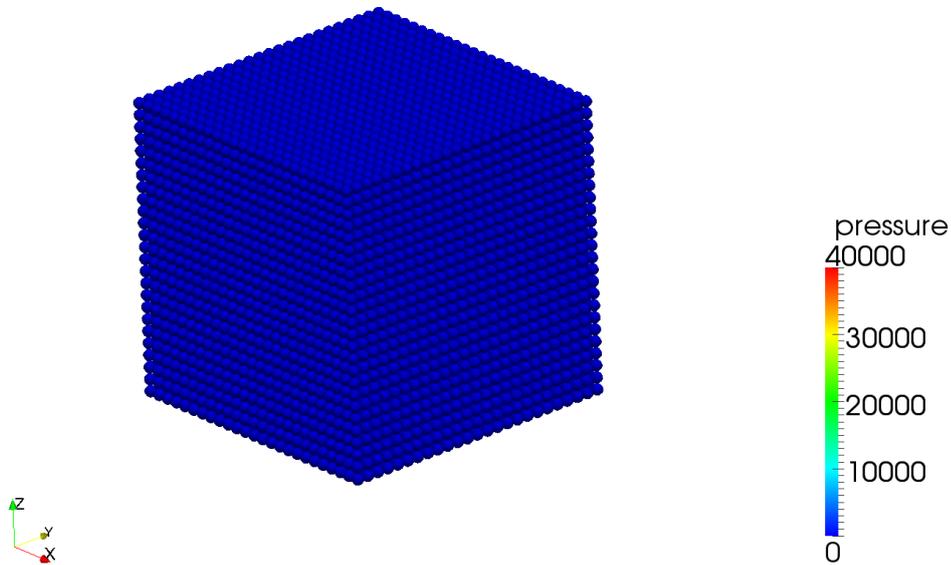


Abb. 18: Startkonfiguration für die Randanalyse, Druck in Pa

Größe in einem Würfel mit einer Ausdehnung von $0,5m \cdot 0,5m \cdot 0,5m = 0,125m^3$ gleichverteilt angeordnet. Somit repräsentieren sie ein Volumen von $V = 125l$. Das Volumen eines Fluidpartikels V_i beträgt dementsprechend $V_i = \frac{0,125}{15.625}m^3 = 8 \cdot 10^{-6}m^3$. Damit folgt ein initialer Fluidpartikelabstand von $\sqrt[3]{8 \cdot 10^{-6}m^3} = 0,02m$.

Um Wasser bei $5^\circ C$ zu simulieren, wird die Dichte der Fluidpartikel mit der Referenzdichte von $1.000 \frac{kg}{m^3}$ initialisiert. Mit dieser Dichte und dem Volumen kann die Masse m_i eines Fluidpartikels bestimmt werden: $m_i = V_i \cdot \rho_i = 8 \cdot 10^{-3}kg$. Wasser besitzt bei $5^\circ C$ eine dynamische Viskosität von $\mu = 1,52 \cdot 10^{-3}Pas$ und eine kinematische Viskosität von $\nu = 1,52 \cdot 10^{-6} \frac{m^2}{s}$.

Die dynamische Viskosität wird genutzt, um simulationsbegleitend zusätzlich die Energiedissipation, vgl. Gleichung (51), zu bestimmen. Diese wird mit der Energie, siehe Gleichung (55), des gesamten Systems verglichen. Erwartet wird, dass sich das Fluid über einen längeren Zeitraum beruhigt, nachdem es auf die Grundfläche des Randes auftrifft. In dieser Zeit sollte Energie dissipieren, also in andere Energieformen umgewandelt werden, und die Wand sollte Energie aufnehmen. Somit wird erwartet, dass der dissipative Anteil sich in der Verringerung der kinetischen und potentiellen Energie widerspiegelt. Die Betrachtungen können nicht exakt sein,

weil durch numerische Ungenauigkeiten und durch die Modellierung Abweichungen entstehen. Eine Ungenauigkeit wird zum Beispiel durch die Korrektur mit XSPH erzeugt, weil diese die Geschwindigkeit in die Richtung der Umgebungsgeschwindigkeiten glättet. Damit wird eine Stabilisierung der Simulation erreicht, jedoch kann dabei die Energieerhaltung verletzt werden.

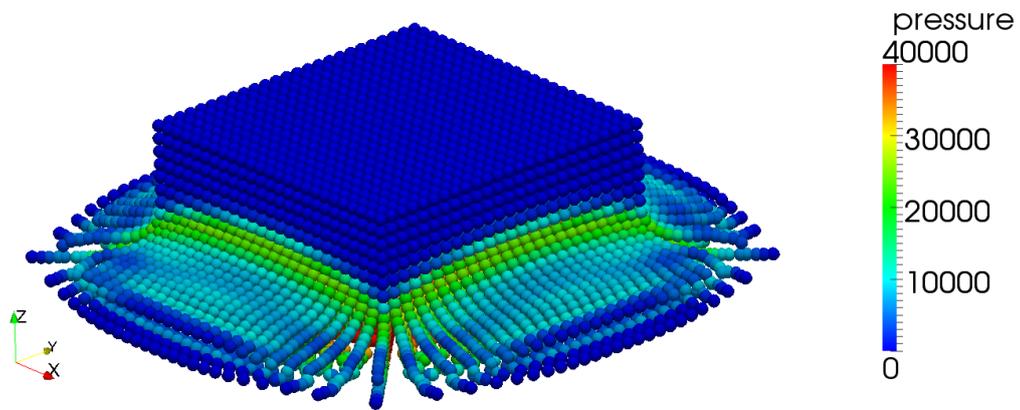
Die Fluidpartikel befinden sich in einem Rechengebiet von $1m \cdot 1m \cdot 1m = 1m^3$, mittig in einer Höhe von $0,1m$ über der Grundfläche. Am Rand des Rechengebietes wird die Randmodellierung so vorgenommen, dass die Fluidpartikel dort eine Kraft erfahren.

Die Gravitation ist die Kraft, die das Fluid in Bewegung setzt. Dazu wird der relative Druck mit $0Pa$, die Geschwindigkeit mit $0\frac{m}{s}$ und die Beschleunigung mit $0\frac{m}{s^2}$ initialisiert. Auf die Fluidpartikel wirkt die Gravitation mit $-9,81\frac{m}{s^2}$ in die Richtung z , welche die Höhe repräsentiert. Der Referenzdruck wird auf den Normaldruck $p_{ref} = 101.300Pa$ gesetzt. Für die Simulation wurde die Zeitschrittweite $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3}s$ gewählt.

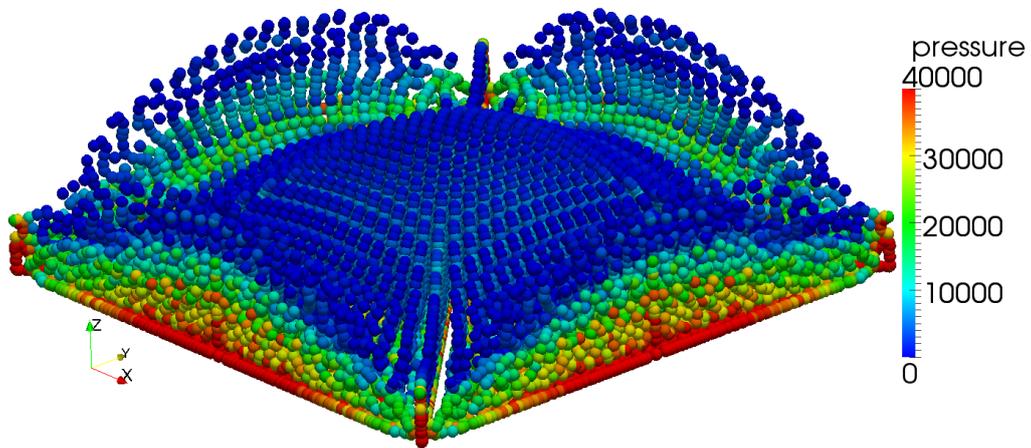
7.2 Elastischer Stoß

In diesem Abschnitt wird die Berechnung einer Simulation mit der Startkonfiguration aus Abschnitt 7.1 vorgestellt. Dabei wird am Rand des Gebietes ein elastischer Stoß modelliert. In der ersten Phase der Simulation fallen die Fluidartikel, weil die Gravitation auf sie wirkt. Das Auftreffen an der Grundfläche ist in der Abbildung 19(a) zu erkennen. Nach dem Auftreffen breitet sich das Fluid nach allem Seiten aus und verteilt sich gleichmäßig in das durch den Rand begrenzte Gebiet. Nach zweitausend Iterationen, also zwei Sekunden Simulationszeit, hat sich das Fluid beruhigt, siehe Abbildung 19(c). Diese Berechnungen sind am Rand instabil und es wird Energie erzeugt. Die zusätzliche Energie ist durch die Erhöhung des Drucks der am Rand befindlichen Fluidpartikel zu erkennen. Dieses Verhalten ist unphysikalisch und somit unerwünscht für eine Strömungssimulation. Im weiteren Verlauf der Simulation folgt eine Kraftentwicklung, aus der eine Bewegung resultiert. Die erhöhte Kraft ist in Abbildung 20 an dem hohen Druck am Rand zu erkennen.

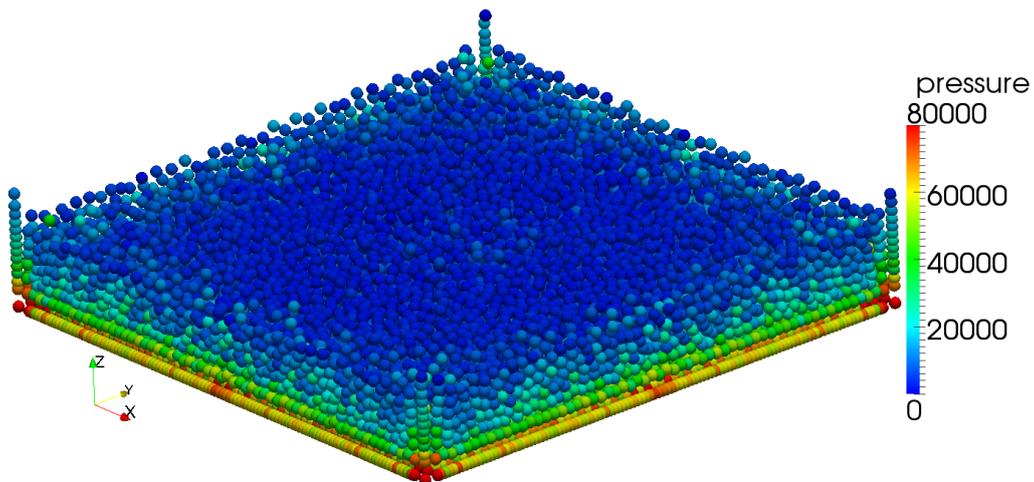
Ein energieerzeugender Rand kann nützlich sein, wenn dieser Effekt erwünscht ist. Jedoch lässt sich bei dieser Randmodellierung die zugeführte Energie nicht steuern.



(a) Auftreffen der Partikel auf dem Rand nach 0,28 Sekunden



(b) Erreichen der Wand nach 0,41 Sekunden



(c) Beruhigung der Partikel nach 2,0 Sekunden

Abb. 19: Simulation mit elastischem Stoß als Randbehandlung, Druck in Pa

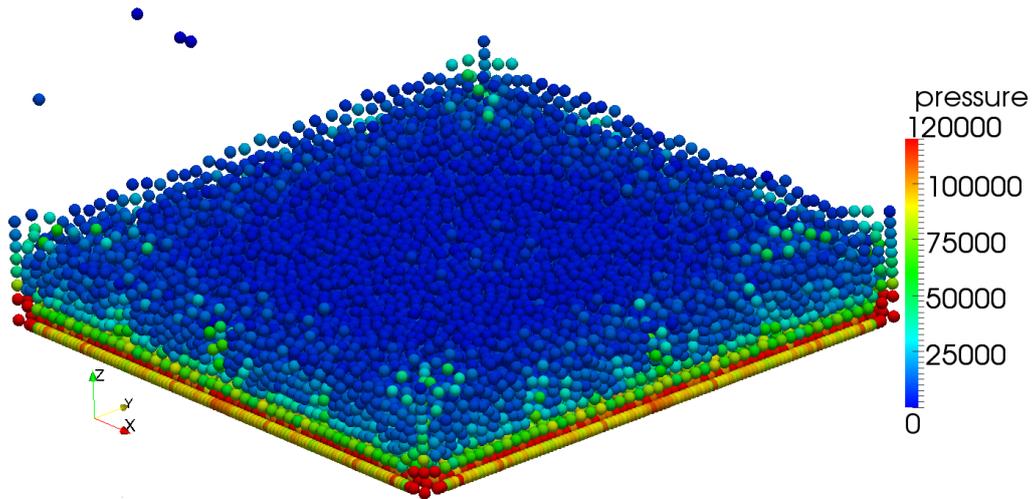


Abb. 20: Druckerhöhung am Rand beim elastischen Stoß (nach 10,0 Sekunden), Druck in Pa

Somit ist der elastische Stoß als einzige Variante eines Randes unzureichend. Ein großer Vorteil des elastischen Stoßes besteht jedoch darin, dass kein Fluidpartikel aus dem Simulationsgebiet entweicht.

Die Energie dieses Systems über die Zeit ist in Abbildung 21 dargestellt. Dort sind die kinetische Energie (grün, E_{kin}) und die potentielle Energie (blau, E_{pot}) aufgetragen. Wenn keine Reibung am Rand und keine Viskosität im Fluid besteht, sollte die Summe dieser beiden Energien eine konstante Gerade beschreiben. In der Simulation treten allerdings Reibung und Viskosität auf und müssen daher betrachtet werden. Aus diesem Grund ist die Summe der kinetischen und potentiellen Energie, dargestellt durch die rote Kurve (E), nicht konstant. Der Energieverlust durch die Geschwindigkeitskorrektur (E_{XSPH}), vgl. Gleichung (50), wird durch die violette Kurve repräsentiert. Die Energie, die durch die Viskosität dissipiert, kann mit der Energiedissipation (E_{diss}), vgl. Gleichung (51), bestimmt werden und ist in der Farbe cyan dargestellt. Die Summe der Energie durch die Geschwindigkeitskorrektur XSPH, der Energiedissipation, der kinetischen Energie und der potentiellen Energie ist als braune Kurve abgebildet (E_{gesamt}). Der Vergleich der Energien wird bei den folgenden Randbetrachtungen ebenfalls durchgeführt. Dabei sind die Farben analog zu Abbildung 21 gewählt. Auch die Darstellung der Simulation erfolgt für die nächsten Randbehandlungen an den die Simulation charakterisierenden Iterationsschritten 280, 410 und 2.000.

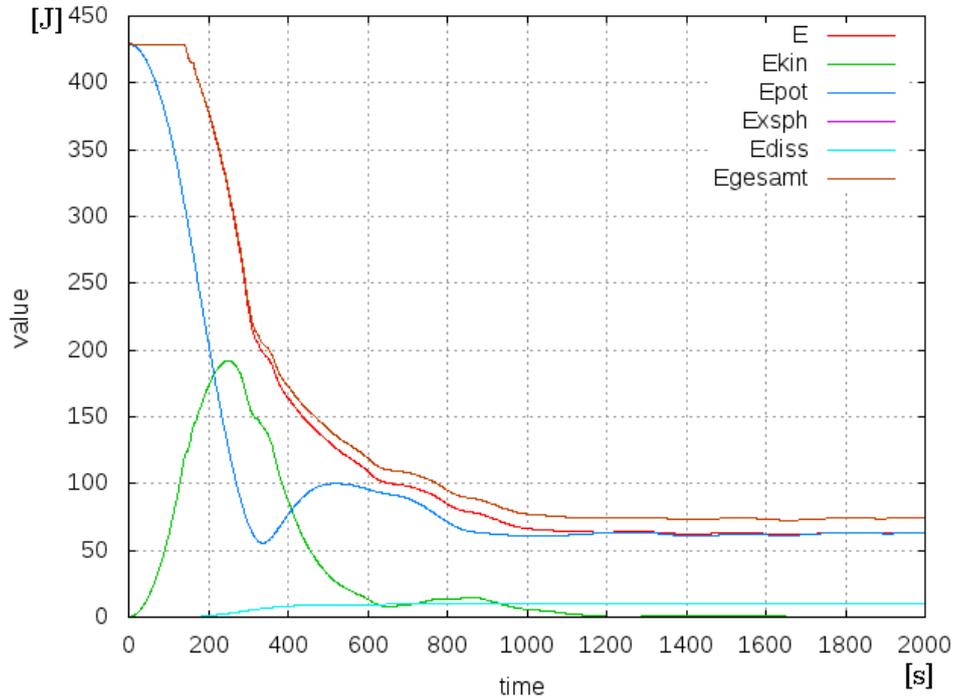


Abb. 21: Energieverlauf beim elastischen Stoß

Zum Simulationsbeginn ist keine kinetische Energie vorhanden, da sich der Fluidblock in Ruhe befindet. Beim Fall der Fluidpartikel wird die potentielle Energie in kinetische Energie umgewandelt. Beim Aufprall wird die kinetische Energie wiederum in andere Energieformen umgewandelt. Die potentielle Energie hat zu Simulationsbeginn ihren maximalen Wert und nimmt durch den Fall der Fluidpartikel ab. Weiterhin weist der Kurvenverlauf der potentiellen Energie noch ein paar Wellen auf, die das Schwappen des Fluids wiedergeben. Das Wechselspiel zwischen kinetischer und potentieller Energie ist dabei zu erkennen. Insgesamt betrachtet beruhigt sich der Energieverlauf des simulierten Fluids schnell. Vom Simulationsbeginn bis zum Aufprall hat die Energiedissipation den Wert Null, weil sich die Fluidpartikel mit der gleichen Geschwindigkeit bewegen und somit keine Scherkräfte entstehen. Außerdem berühren sie den Rand nicht und daher ist keine Reibung vorhanden. Der Energieverlust durch die Geschwindigkeitskorrektur ist im Vergleich zu den anderen Energien vernachlässigbar. Die Summe von kinetischer Energie, potentieller Energie, Energiedissipation und Energieverlust durch die Geschwindigkeitskorrektur verringert sich im Verlauf der Simulation. Diese Energie wird von der Wand aufgenommen.

7.3 Wandpartikel

Mit Wandpartikeln können verschiedene Arten der Randbehandlung modelliert werden. In diesem Abschnitt werden drei Arten mit der Startkonfiguration aus Abschnitt 7.1 simuliert und ausgewertet.

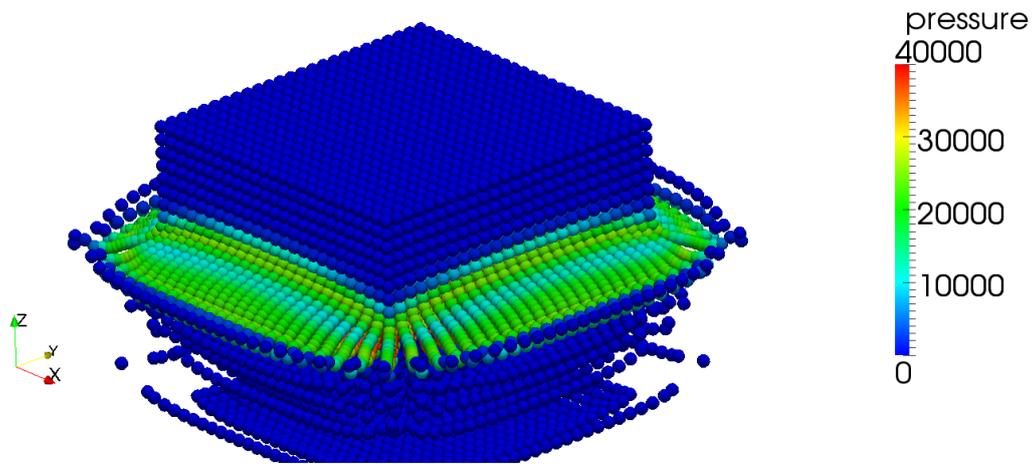
Die Wandpartikel werden zunächst wie die Fluidpartikel initialisiert. Die Dichte ist $\rho_i = 1.000 \frac{kg}{m^3}$, die Masse ist $m_i = 8 \cdot 10^{-3} kg$ und der Partikelabstand ist auf $0,02m$ in jede Richtung gesetzt. Daraus folgt, dass pro Randfläche von $1m \cdot 1m$ genau $50 \cdot 50 = 2.500$ Wandpartikel benötigt werden. Das ergibt insgesamt 15.000 Wandpartikel für die sechs Ränder. Diese werden fixiert und bilden somit den Rand für die beweglichen Fluidpartikel.

Wandpartikel müssen auf Fluidpartikel wirken, damit diese eine Gegenkraft erfahren und den Rand nicht durchdringen. Die Fluidpartikel müssen auch Einfluss auf die Wandpartikel haben, sodass die Gegenkraft entsprechend der Fluidpartikel dimensioniert wird. Dieses Wechselspiel wird erreicht, indem sich beide Partikelarten bei den Berechnungen gegenseitig berücksichtigen.

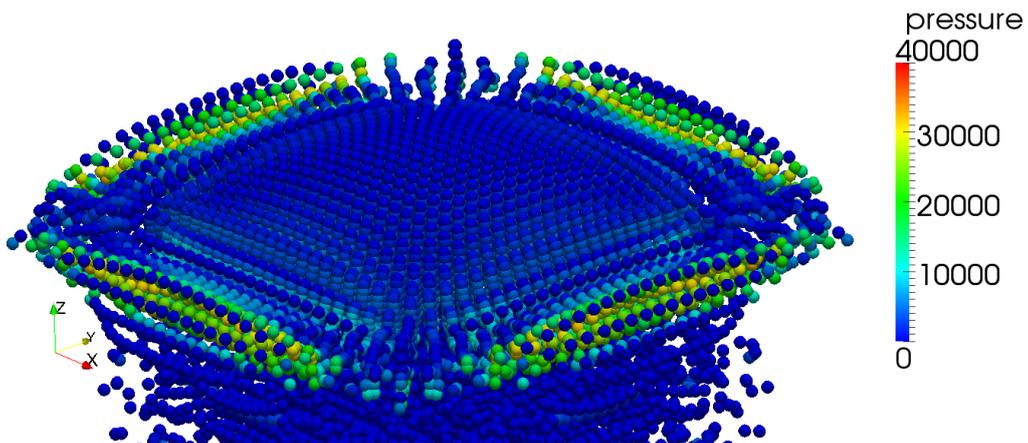
Als erste Randbehandlung werden dazu die Gleichungen für den Druck (32) und die zeitliche Dichteänderung (37) für alle Partikel berechnet. Die Druckkraft (42), die Kraft durch die Viskosität (49) und die Geschwindigkeitskorrektur (50) müssen nur für die Fluidpartikel ermittelt werden, weil die Wandpartikel keine Bewegung durchführen. Die daraus resultierende Simulation wird in Abbildung 22 dargestellt.

Zu erkennen ist, dass die Fluidpartikel beim Auftreffen auf der Grundfläche des Randes, vgl. Abbildung 22(a), diesen durchdringen. Das Durchdringen setzt sich im weiteren Verlauf der Simulation fort, vgl. Abbildungen 22(b) und 22(c). Somit ähnelt diese Randbedingung einem porösen Medium und ist dementsprechend nicht zielführend. Die Energiebilanz aus Abbildung 23 ist demzufolge nicht aussagekräftig, weil die Fluidpartikel eine negative Höhe erhalten. Die Gegenkraft der Wand bremst die Fluidpartikel. Jedoch reicht die Kraft nicht aus, die Fluidpartikel in das Rechengebiet zurückzudrängen. Grund dafür ist der geringe Druck am Rand, der wiederum aus einer zu geringen Dichte der Wandpartikel resultiert.

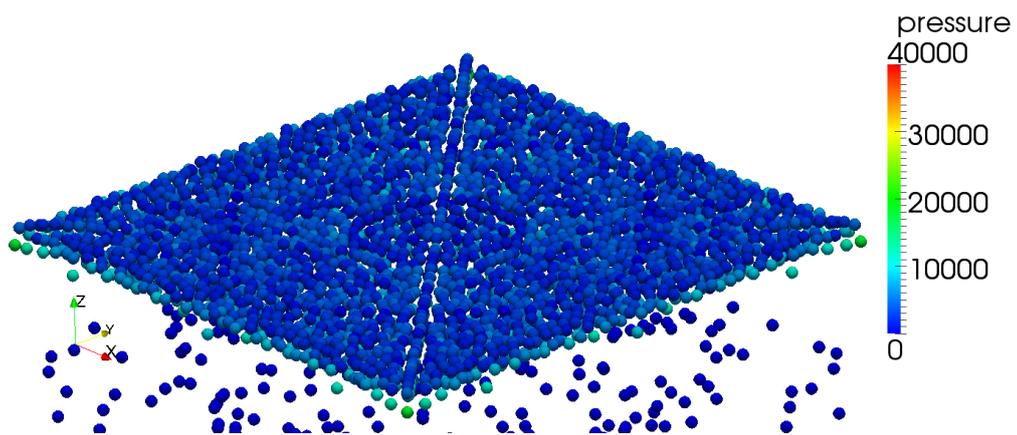
Die Berechnung der Dichte der Fluid- und Wandpartikel erfolgt für die obige Simulation unter der Berücksichtigung der Dichteänderung, vgl. Gleichung (37). Diese Gleichung wurde gewählt, weil bei der alternativen Berechnung mit Gleichung (34)



(a) Auftreffen der Partikel auf dem Rand nach 0,28 Sekunden



(b) Durchbruch der Partikel durch den Rand nach 0,41 Sekunden



(c) Beruhigung der Partikel nach 2,0 Sekunden

Abb. 22: Simulation mit Fluidpartikel gleichen Wandpartikeln als Randbehandlung, Druck in Pa

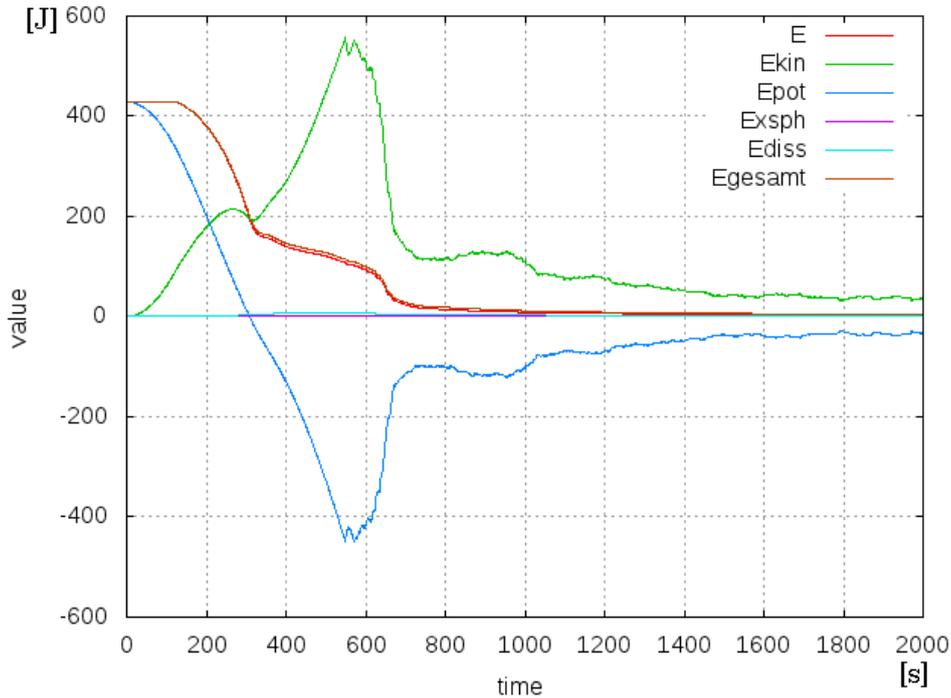


Abb. 23: Energieverlauf mit Wandpartikeln als Randbehandlung

ein mindestens genauso schwerwiegendes Problem vorherrscht. Das Problem der Dichteberechnung durch Gleichung (34) besteht darin, dass Partikel am Rand des Fluidblocks weniger Nachbarinformationen erhalten. Somit erhalten diese eine zu geringe Dichte. Eine Anpassung der Gleichung für die Fluidpartikel kann nicht vorgenommen werden, weil die Positionen der Fluidpartikel sich ändern. Dieses Problem tritt für verschiedene Fluidpartikel über die Zeit auf. Somit ist die Betrachtung der Dichteänderung für die Ermittlung der Dichte der Fluidpartikel stabiler. Dies trifft nicht auf die Wandpartikel zu, weil sie eine fixierte Position besitzen.

Als zweite Randbehandlung mit Wandpartikeln soll daher eine Variante der ersten Randbehandlung mit Wandpartikeln untersucht werden. Modifiziert wird dabei die Dichteberechnung der Wandpartikel. Als Voraussetzung dafür dient die starre Positionierung der Wandpartikel des Randes. Wird der Rand separat betrachtet ohne Einfluss der Fluidpartikel, dann sollte die Dichte am Rand konstant sein. Wenn Fluidpartikel sich den Wandpartikeln nähern, muss sich die Dichte der Wandpartikel erhöhen, um somit eine entsprechende Gegenkraft zu erzeugen. Dazu kann die Gleichung (34) genutzt werden. Diese wird so angepasst, dass die Summe über die Nachbarfluidpartikel n_{fi} läuft und zusätzlich die Referenzdichte der Wandpartikel

ρ_{wref} als Term mit eingeht. Daraus folgt die Gleichung

$$\rho_i = \rho_{wref} + \sum_{j=0}^{n_{fl}} (m_j W(\mathbf{r}_{ij}, h)). \quad (70)$$

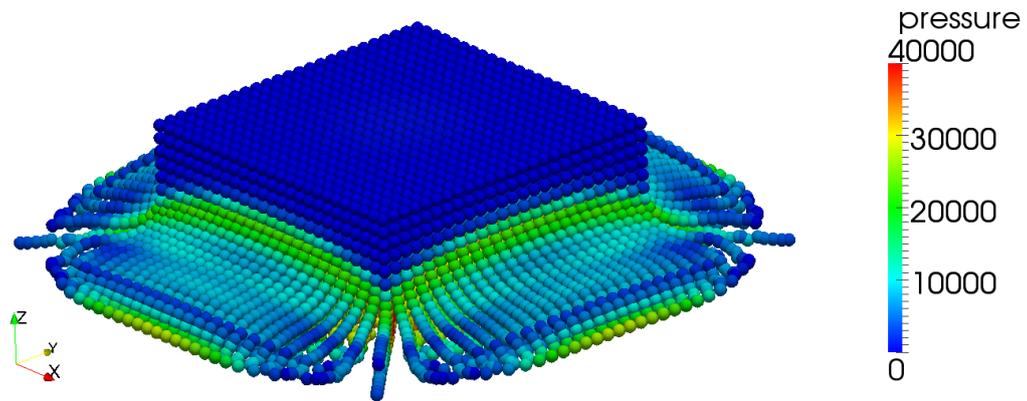
Die Dichteberechnung der Fluidpartikel erfolgt weiterhin mit Gleichung (37). Diese Änderung zu der ersten Randbetrachtung mit Wandpartikeln führt zum in Abbildung 24 dargestellten Ergebnis. Der hierbei erreichte Rand ist undurchlässiger als die vorangegangene Randbehandlung mit Wandpartikeln und erzeugt keinen übermäßigen Druck am Rand, wie der elastische Stoß (vgl. Abschnitt 7.2).

Einige Fluidpartikel durchdringen dennoch den Rand an den unteren Ecken, siehe Abbildung 24(b). Ein kleinerer Zeitschritt kann dieses Problem lösen, weil die Randpartikel dann sensitiver gegenüber den Fluidpartikeln mit höherem Impuls sind.

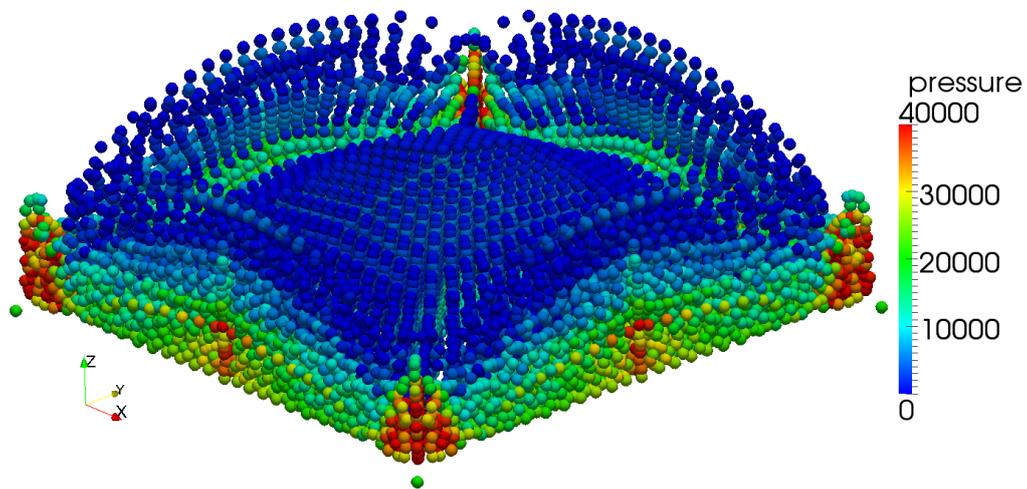
Die Energie zu dieser Randbehandlung ist in Abbildung 25 dargestellt. Hierbei ist ein ähnlicher Verlauf wie beim elastischen Stoß zu erkennen, vgl. Abschnitt 7.2. Insgesamt dauert es jedoch länger, bis sich das Fluid beruhigt. Das stärkere Schwappen des Fluids ist an der erhöhten Anzahl der Schwingungen zu erkennen. Etwa zum Zeitschritt 300 bis 350 ist eine Störung in dem Energieverlauf zu sehen.

Anstatt die Dichteberechnung anzupassen, kann auch die Berechnung der Druckkraft variiert werden, um die Gegenkraft des Randes zu verbessern. Dazu wird die Abstandsfunktion aus Gleichung (58) genutzt. Diese dritte Art der Randbehandlung mit Wandpartikeln ist in Abbildung 26 dargestellt. Es handelt sich bei dieser Konstellation um die erste Untersuchung mit Wandpartikeln, bei welcher der Rand nicht mehr von Fluidpartikel durchdrungen wird. Jedoch schwingen die Fluidpartikel in Wandnähe und kommen nicht zur Ruhe. Da sie stets in das Gebiet zurückgedrängt werden, wenn sie einen gewissen Abstand zu den Wandpartikeln unterschritten haben, kommt ihr Verhalten einem Zittern nah. Dieses Zittern lässt sich in erstellten Animationen der Simulation gut beobachten, ist aber auf den Abbildungen nicht darstellbar.

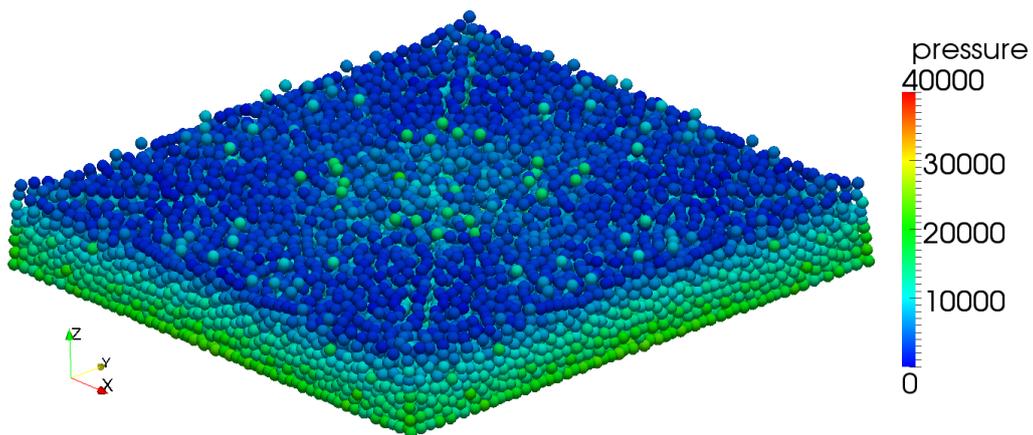
Die Energiebilanz zu diesem Rand ist in Abbildung 27 dargestellt. Auch hierbei ist ein ähnlicher Verlauf wie beim elastischen Stoß zu erkennen, vgl. Abschnitt 7.2. Die Wellenbewegung lässt schneller nach, als bei der modifizierten Dichteberechnung der Wandpartikel und auch schneller als beim elastischen Stoß. Der glatte Kurvenverlauf der kinetischen Energie wird durch kleine Störungen unterbrochen (ca. Zeitschritt



(a) Auftreffen der Partikel auf dem Rand nach 0,28 Sekunden



(b) Erreichen der Wand nach 0,41 Sekunden



(c) Beruhigung der Partikel nach 2,0 Sekunden

Abb. 24: Simulation mit modifizierter Dichteberechnung der Wandpartikel als Randbehandlung, Druck in Pa

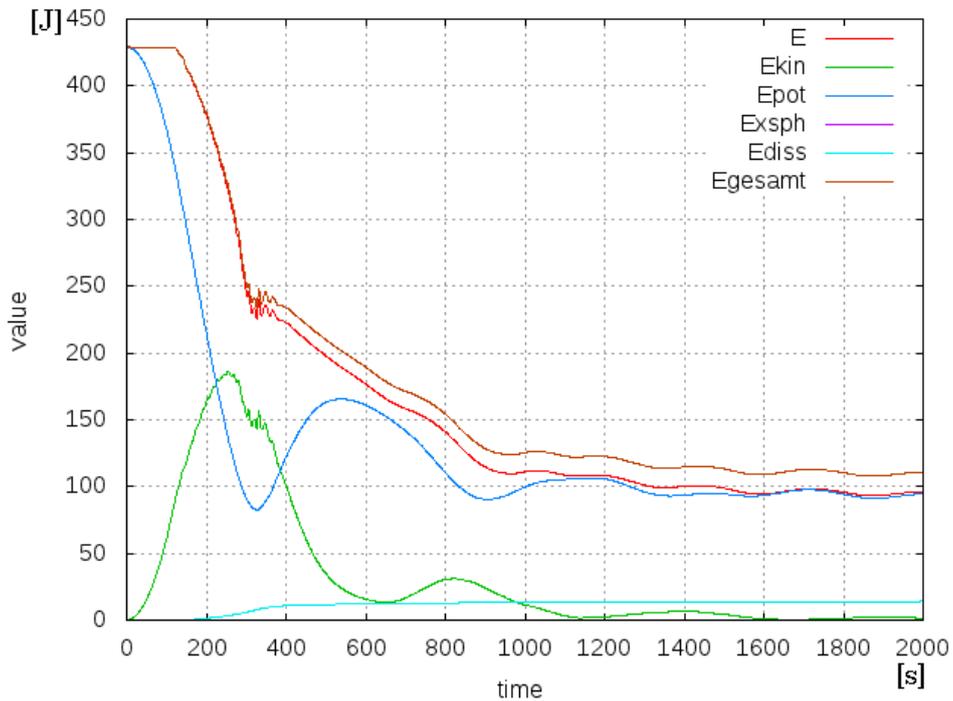
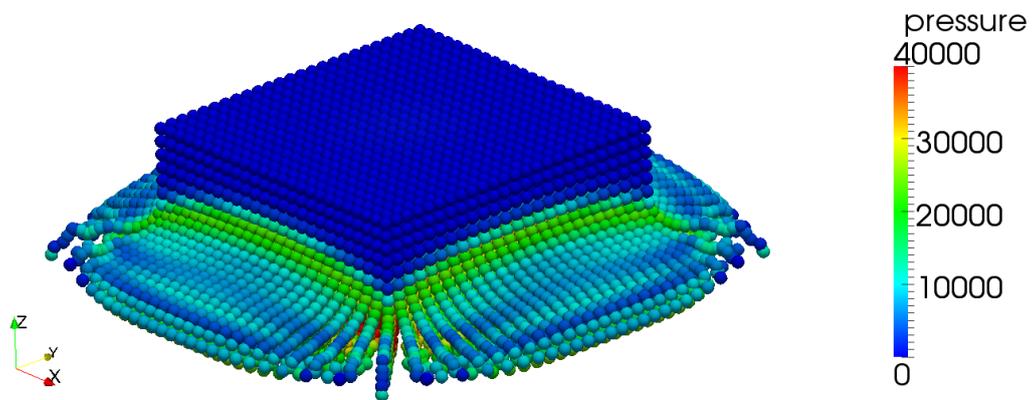


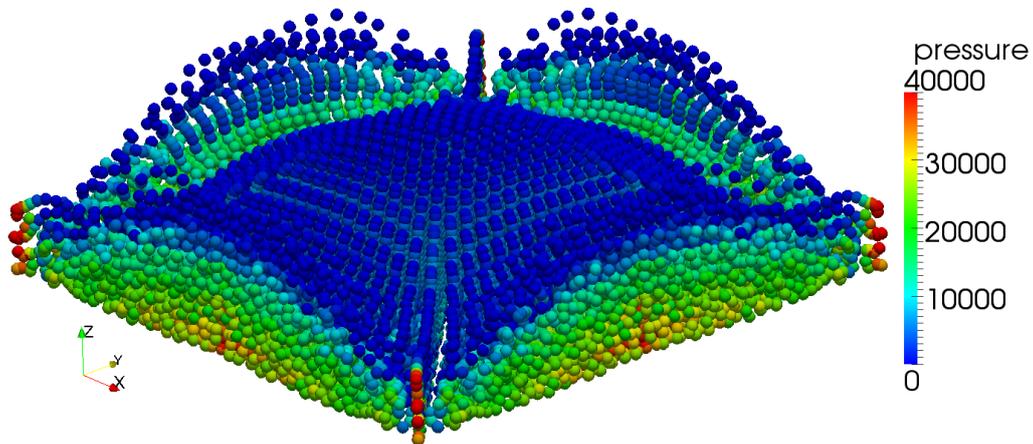
Abb. 25: Energieverlauf mit modifizierter Dichteberechnung der Wandpartikel als Randbehandlung

150 bis 300). Das zeigt, dass beim Aufprall der Fluidpartikel auf den Rand kinetische Energie erzeugt wird. Diese Energieerzeugung entsteht durch die Druckkraft aus Gleichung (58), welche auf Fluidpartikel mit geringem Wandabstand wirkt.

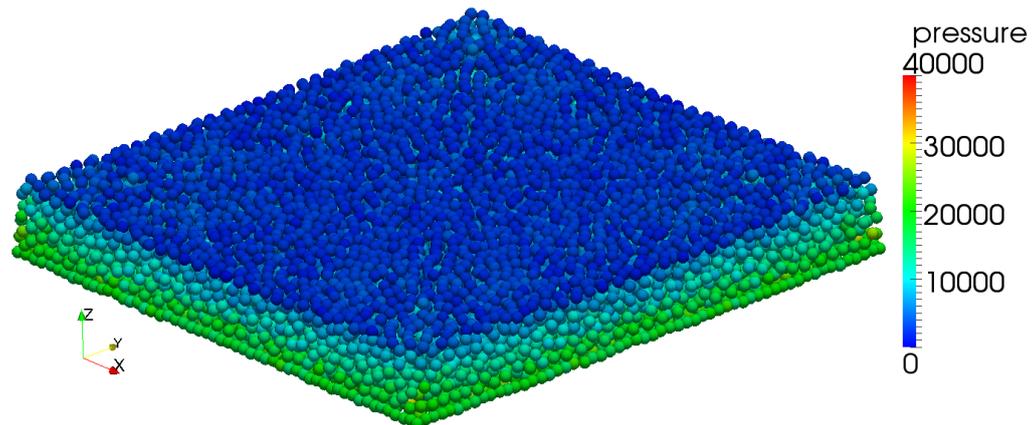
Da bisher noch keine Randbehandlung zufriedenstellend ist, wird die Kombination von Randbehandlungen in Erwägung gezogen. Die einzige energetisch stabile Randbehandlung ist die mit der modifizierten Dichteberechnung für die Wandpartikel. Nachteilig an dieser Randbehandlung ist der Verlust von einigen Fluidpartikeln am Rand des Simulationsgebietes. Um dieses Defizit auszugleichen, ist eine Kombination mit dem elastischen Stoß denkbar. Diese wird im folgenden Abschnitt untersucht.



(a) Auftreffen der Partikel auf dem Rand nach 0,28 Sekunden



(b) Erreichen der Wand nach 0,41 Sekunden



(c) Beruhigung der Partikel nach 2,0 Sekunden

Abb. 26: Simulation mit Abstandsfunktion zu den Wandpartikeln als Randbehandlung, Druck in Pa

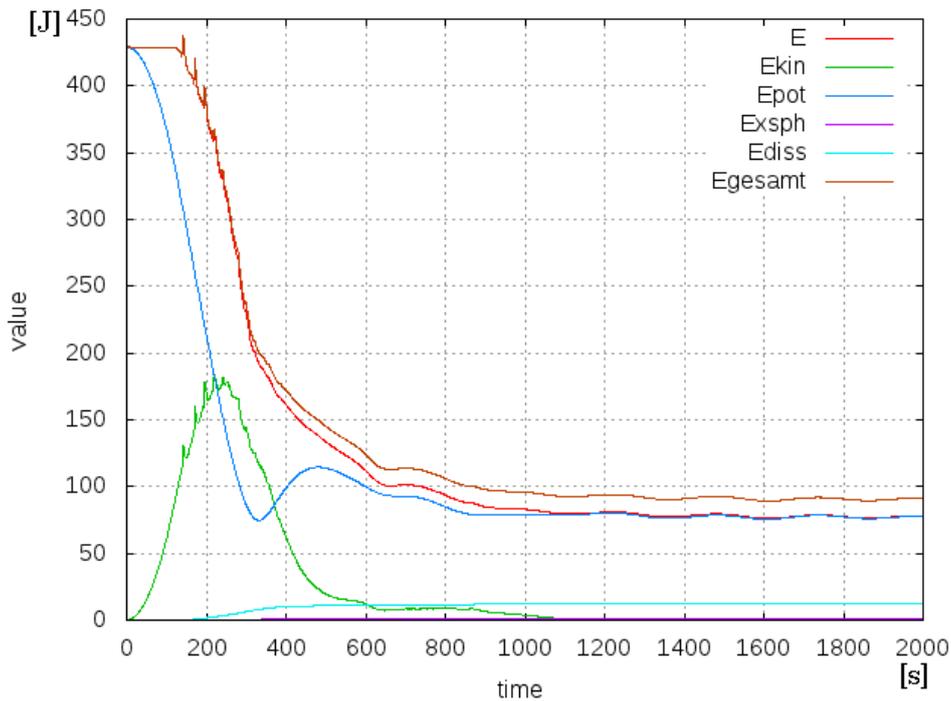
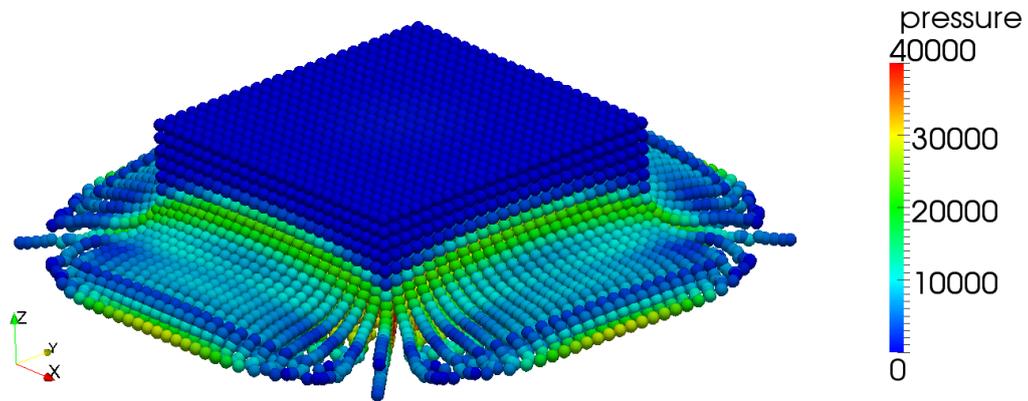


Abb. 27: Energieverlauf mit Abstandsfunktion zu den Wandpartikeln als Randbehandlung

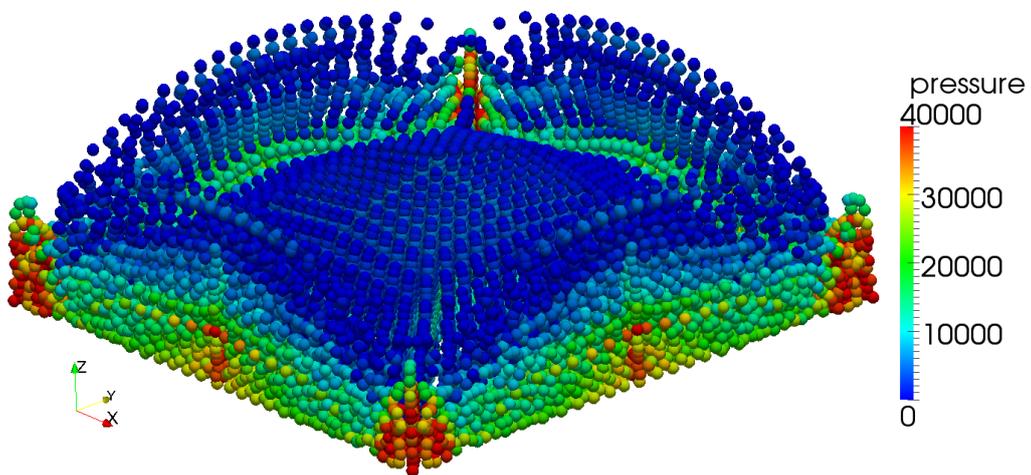
7.4 Kombination von elastischem Stoß und Wandpartikeln

Die neuartige Kombination von elastischem Stoß und Wandpartikeln soll in diesem Abschnitt Gegenstand der Untersuchung sein. Dabei sollen die Wandpartikel mit der modifizierten Dichteberechnung die eigentliche Randbehandlung darstellen und physikalisch auf das Fluid wirken. Einzig die wenigen Fluidpartikel, die den Rand durchstoßen würden, sollen durch einen elastischen Stoß ins Simulationsgebiet zurückgestoßen werden. In Abbildung 28 werden die Ergebnisse der Simulation dargestellt. Es durchdringt nun kein einziges Partikel mehr den Rand. Einzelne Fluidpartikel, die dem Rand zu nah kommen, werden von der elastischen Stoßrandbedingung zurückgehalten und von den Wandpartikeln so beeinflusst, dass sie zurück ins Simulationsgebiet gedrängt werden.

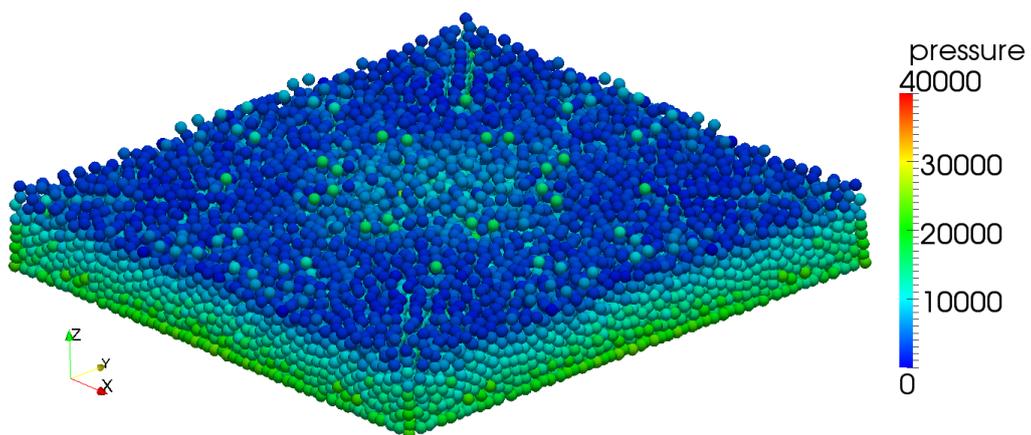
Die Energie dieses Systems ist in Abbildung 29 dargestellt. Der Energieverlauf zeigt den gleichen Verlauf wie die Betrachtung ohne elastischen Stoß. Auch die Störung von Zeitschritt 300 bis 350 ist vorhanden.



(a) Auftreffen der Partikel auf dem Rand nach 0,28 Sekunden



(b) Erreichen der Wand nach 0,41 Sekunden



(c) Beruhigung der Partikel nach 2,0 Sekunden

Abb. 28: Simulation mit einer Kombination aus elastischem Stoß und modifizierten Wandpartikeln als Randbehandlung, Druck in Pa

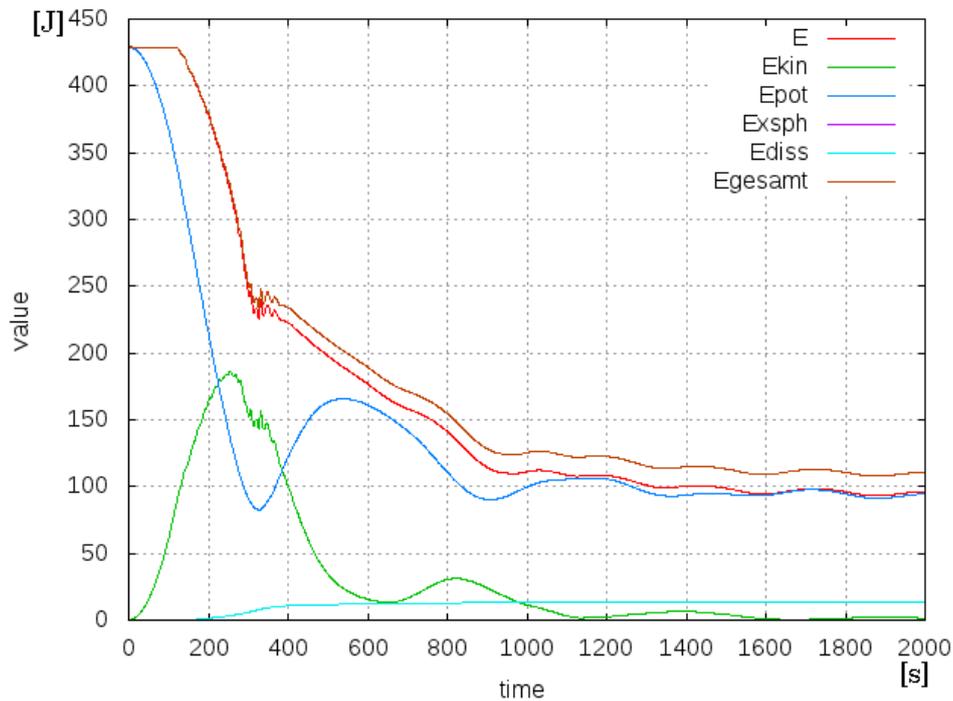


Abb. 29: Energieverlauf mit einer Kombination aus elastischem Stoß und modifizierten Wandpartikeln

7.5 Bewertung der Ergebnisse

In Tabelle 4 sind die verschiedenen Randbehandlungen mit ihrem ermittelten Verhalten zusammenfassend dargestellt. Die Undurchlässigkeit beschreibt, ob die Fluidpartikel im Simulationsgebiet verbleiben. Das Energieverhalten gibt an, ob die Energie sich wie erwartet verhält oder zunimmt. Das +-Zeichen steht für eine Erfüllung der Anforderung. Dementsprechend deutet das --Zeichen an, dass die Bedingung nicht erfüllt wurde. Wenn keine Aussage möglich ist, steht der Platzhalter /.

Wie gut in der Tabelle zu erkennen ist, bildet die Kombination von elastischem Stoß und den Wandpartikeln mit der modifizierten Dichteberechnung eine ausreichend stabile und undurchlässige Randbehandlung für die Untersuchung von Kernelvariationen. Es wird, im Gegensatz zum reinen elastischen Stoß, keine zusätzliche Energie erzeugt, vgl. Abschnitt 7.2, und die Energie des Systems verhält sich wie erwartet. Keine andere Randbedingung erfüllt alle geforderten Kriterien und bleibt zudem noch über eine lange Simulationsdauer stabil. Für die weiteren Betrachtungen in Kapitel 8 wird daher diese Randbehandlung genutzt. Dabei soll auch untersucht

Tabelle 4: Vergleich der verschiedenen Randbehandlungen

Rand	Undurchlässigkeit	Energieverhalten	Bemerkungen
elastischer Stoß	+	–	
Wandpartikel	–	/	
modifizierte Wandpartikel	–	+	
Abstandsfunktion	+	–	Zittern am Rand
Kombination	+	+	stabil über langen Zeitraum

werden, ob die Störungen in den Energieverläufen durch die Variation der Kernel-
 funktion verschwindet.

8 SPH Simulationen zur Analyse von Kernelvariationen

Das Ziel einer Analyse von Kernelvariationen ist die Ermittlung der genauesten und stabilsten Kernelfunktion, um bestmögliche Simulationen durchführen zu können. Zu diesem Zweck wurde im Kapitel 7 ein stabiler und undurchlässiger Rand identifiziert. Dieser Rand wird für den Vergleich der *C2*-, der *poly6*- und der *spiky*-Kernelfunktion für alle Anwendungsfälle genutzt. Dabei wird jeweils in der Simulation eine Kernelfunktion in allen Gleichungen angewendet. Die Wahl fiel auf diese Kernelfunktionen, weil sie in der Literatur oft Anwendung bei der SPH Methode finden, sich also schon etabliert haben.

In diesem Kapitel soll zunächst in Abschnitt 8.1 ermittelt werden, wie stark die Dichteänderung bei der schwach kompressiblen SPH Methode ist. Dazu wird eine Testrechnung aus der Arbeit von [BLS12] aufgesetzt und mit den verschiedenen Kernelfunktionen simuliert. Weiterhin wird untersucht, ob der Dichtedurchschnitt von der Fluidtiefe abhängig ist.

Im nächsten Abschnitt 8.2 wird ein Dammbbruchproblem als Validierungsfall vorgestellt. Dieser Anwendungsfall wird mit einem realen Experiment und Ergebnissen anderer Programme zur Strömungssimulation verglichen, um die unterschiedlichen Genauigkeiten festzustellen, die mit den verschiedenen Kernelfunktionen bei gleichen Anwendungsfällen erreicht werden können.

Weiterhin wird die Mischung zweier verschiedener Fluide, auch zwei Medien genannt, in Abschnitt 8.3 simuliert. Damit soll eine Stärke der SPH Methode aufgezeigt werden: Es ist möglich mit der SPH Methode verschiedene Fluide in einer Simulation zu modellieren.

Zur Vergleichbarkeit der Anwendungsfälle sind einige Parameter für alle Simulatio-

nen gleich vorgegeben. Das sind der Referenzdruck $p_{ref} = 101.300Pa$, der Abstand der Fluid- und Randpartikel $\mathbf{r}_{ij} = 0,02m$, die dynamische Viskosität von Wasser $\mu = 1,52 \cdot 10^{-3}Pas$, $\epsilon = 0,1$ für die Geschwindigkeitskorrektur XSPH und eine Zeitschrittweite von $\Delta t = 10^{-3}s$.

Im Gegensatz zu den Energiebilanzen des Kapitels 7 enthalten die folgenden Bilanzen keine Komponente für die Geschwindigkeitskorrektur XSPH mehr, da diese verschwindend gering war und somit für die Betrachtungen irrelevant ist.

8.1 Vergleich der Dichteänderung bei verschiedenen Kernelfunktionen

Die SPH Methode ist, wie in Kapitel 3 beschrieben, leicht kompressibel. Bodin et al. vergleichen die Dichteänderung der Standard SPH Methode mit ihrer Erweiterung in ihrer Arbeit [BLS12]. Dazu simulieren sie 10.000 Fluidpartikel mit einer Dichte von $1.000 \frac{kg}{m^3}$ und einer Masse von $7 \cdot 10^{-3}kg$ pro Fluidpartikel, die ein Volumen von $70l$ repräsentieren. Die Fluidpartikel werden in einen Behälter mit einer Grundfläche von $0,36m \cdot 0,36m$ positioniert. Danach wird eine Simulation durchgeführt, bis sich das Fluid beruhigt. Die dabei ermittelte Dichte der Fluidpartikel liegt im Durchschnitt bei $1.170 \frac{kg}{m^3}$. Es resultiert also ein Fehler in der Dichte von 17%. Dies ist nach [BLS12] besser als das Ergebnis der Standard SPH Methode, wie sie von Monaghan vorgeschlagen wurde. Die oben beschriebene Konfiguration wird in diesem Abschnitt mit der gewählten Randbehandlung aus Kapitel 7 angewandt. Dabei sollen die verschiedenen Kernelfunktionen aus Kapitel 5 miteinander verglichen werden.

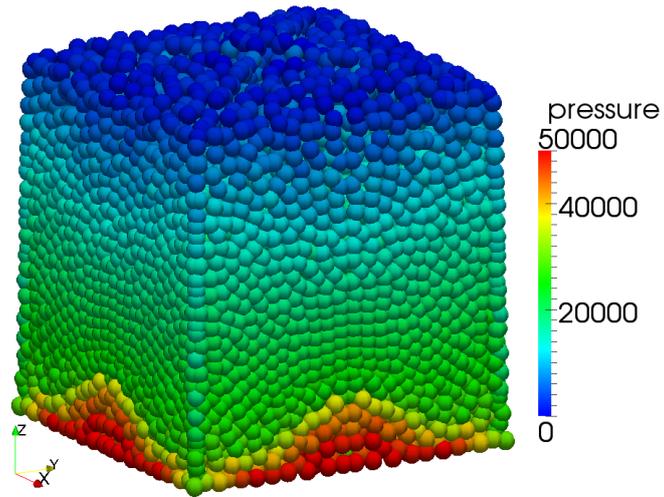
Die Ermittlung der Dichteänderung erfolgt in dieser Arbeit auf zwei verschiedene Arten. Einerseits wird der Dichtedurchschnitt bestimmt, indem die transportierte Dichte aller Fluidartikel gemittelt wird. Andererseits wird das Volumen, das die Fluidpartikel einnehmen, zur Bestimmung des Dichtedurchschnittes herangezogen. Die Abbildung 30 zeigt das Strömverhalten der Simulation zu unterschiedlichen Zeitschritten. Optimal wäre eine Darstellung der Simulationen mit den verschiedenen Kernelfunktionen zum gleichen Zeitpunkt, wenn das Fluid in Ruhe ist. Es müssen jedoch verschiedene Zeitschritte zur Darstellung genutzt werden, da die Berechnungen mit der $C2$ - und der $poly6$ -Kernelfunktion instabil werden. Bei der

$C2$ -Kernelfunktion wird Energie erzeugt, wodurch das Fluid beginnt sich wieder zu bewegen, nachdem es sich beruhigt hat. In Abbildung 30(a) ist die Simulation nach 2.000 Iterationen dargestellt. Dort ist zu erkennen, dass am unteren Rand schon eine Druckerhöhung vorliegt. Die Simulation mit der *poly6*-Kernelfunktion bricht nach 674 Iterationen ab. Abbildung 30(b) zeigt den „stabilsten“ Zustand der Simulation, der somit zum Vergleich herangezogen wird. Die Simulation mit der *spiky*-Kernelfunktion bleibt hingegen stabil und kann somit in Ruhe nach 10.000 Iterationen dargestellt werden, siehe Abbildung 30(c).

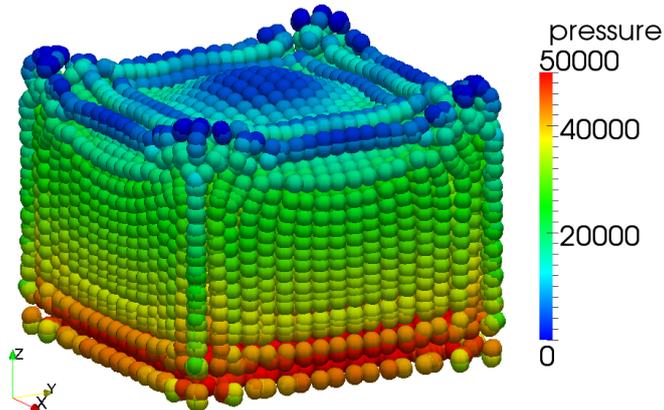
Generell sind die Zeitschritte so gewählt, dass das Fluid sich annähernd beruhigt hat und somit die Ergebnisse für die Betrachtungen herangezogen werden können. Bei der $C2$ - und der *poly6*-Kernelfunktion sind die Ergebnisse jedoch nicht exakt, weil die Beruhigung des Fluids nicht vollständig erfolgt ist. Bei der Anwendung der $C2$ -Kernelfunktion ergibt sich ein Dichtedurchschnitt von $1.032 \frac{kg}{m^3}$ bei der Mittlung der einzelnen Fluidpartikeldichten. Mit dem Volumen von $V = 0,066m^3$, dass die Fluidpartikel einnehmen, errechnet sich ein Dichtedurchschnitt von $1.061 \frac{kg}{m^3}$. Bei der Simulation mit der *poly6*-Kernelfunktion wird ein Dichtedurchschnitt von $1.041 \frac{kg}{m^3}$ durch die Fluidpartikeldichte und von $1.670 \frac{kg}{m^3}$ bei der Volumenbetrachtung ermittelt. Der Dichtedurchschnitt bei der *spiky*-Kernelfunktion liegt bei $1.028 \frac{kg}{m^3}$ durch die Mittlung der Fluidpartikeldichte und bei $1.370 \frac{kg}{m^3}$ durch das eingenommene Volumen von $0,06807m^3$. Diese Ergebnisse zeigen, dass die berechnete Dichte nicht die wirkliche Dichte der einzelnen Fluidpartikel repräsentiert, sondern weit über der realen Dichte liegt. Sie wird genutzt, um eine Druckänderung zu erzeugen, aus welcher dann die Druckkräfte folgen. Diese wiederum sorgen für eine Kraft die der Dichteänderung entgegenwirkt. Wenn die Parameter aufeinander abgestimmt sind, ist die SPH Methode schwach kompressibel.

Im nächsten Schritt wird prinzipiell die gleiche Ausgangssituation simuliert. Der einzige Unterschied liegt in der das Fluid umgebenden Behältergröße. Dessen Grundfläche ist deutlich größer. Es soll festgestellt werden, ob der Dichtedurchschnitt der Fluidpartikel von der Fluidhöhe beeinflusst wird. Dazu wird der Rand der Simulation mit der *spiky*-Kernelfunktion nach 10.000 Iterationen entfernt und durch einen Rand ersetzt, der einen Behälter mit einer Grundfläche von $0,66m \times 0,66m = 0,4356m^2$ repräsentiert. Danach wird die Simulation fortgesetzt und das daraus resultierende Ergebnis nach weiteren 10.000 Iterationen ist in Abbildung 31 dargestellt.

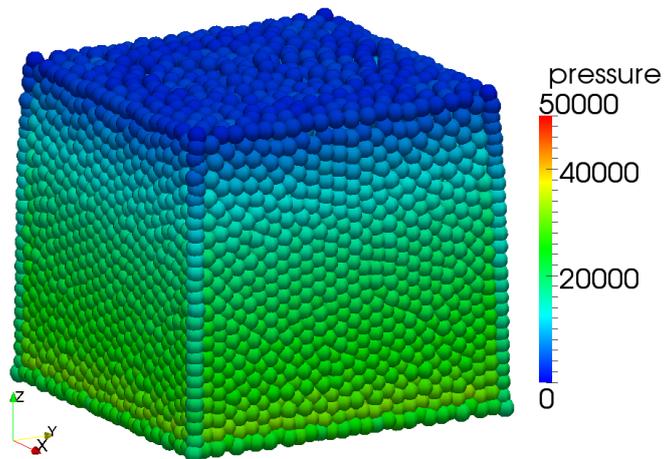
Der Dichtedurchschnitt bei dieser Simulation liegt bei $1.008 \frac{kg}{m^3}$ durch die Mittlung



(a) *C2*-Kernelfunktion nach 2,0 Sekunden (2.000 Iterationsschritte)



(b) *poly6*-Kernelfunktion nach 0,3 Sekunden (300 Iterationsschritte)



(c) *spiky*-Kernelfunktion nach 10 Sekunden (10.000 Iterationsschritte)

Abb. 30: Analyse des Dichtedurchschnittes mit großer Fluidtiefe, Druck in Pa

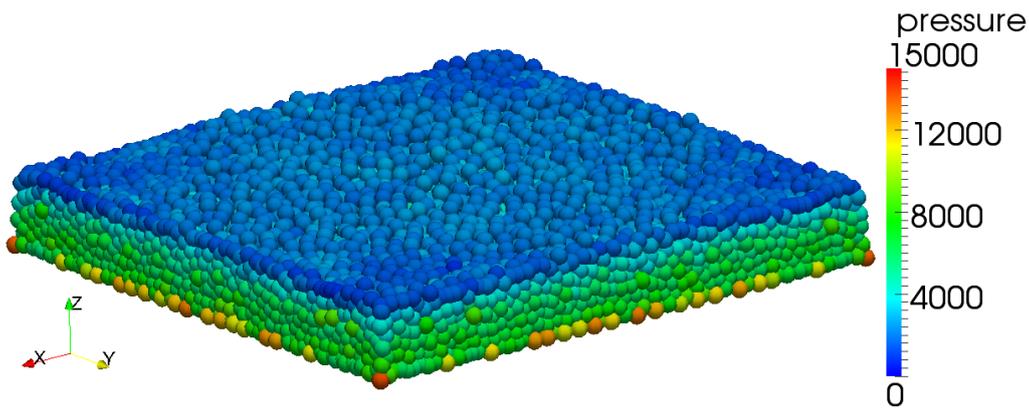


Abb. 31: Analyse des Dichtedurchschnittes mit geringer Fluidtiefe, Druck in Pa

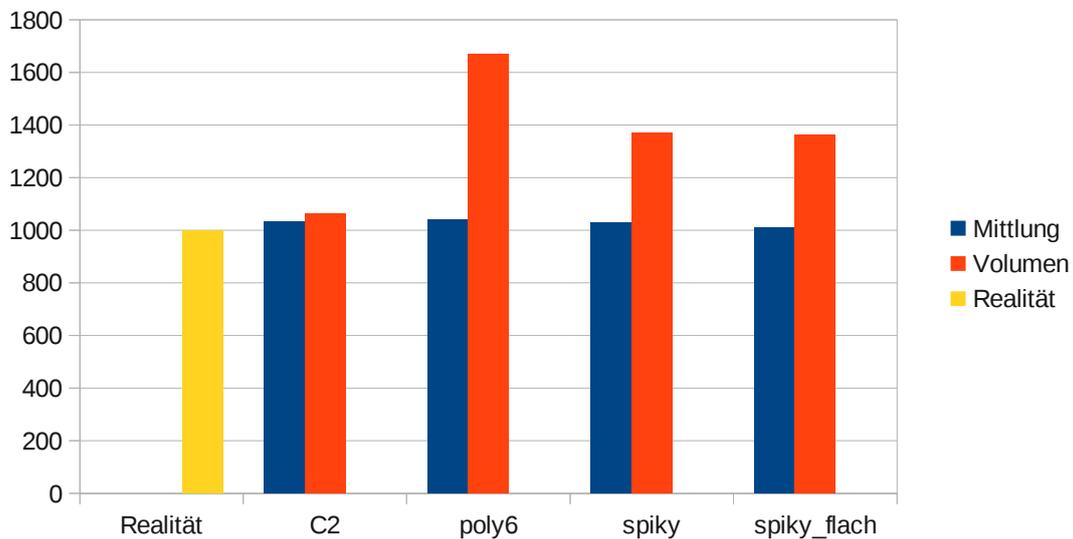


Abb. 32: Vergleich der ermittelten Dichten

der Fluidpartikeldichte und bei $1.362 \frac{kg}{m^3}$ durch das eingenommene Volumen von $0,051409m^3$. Die Variation der Fluidtiefe erzeugt keinen wesentlichen Unterschied bei der Dichtebetrachtung. Die ermittelten Werte für die Dichtebetrachtung sind in Abbildung 32 zusammengefasst.

8.2 Kernelfunktionen beim Dambruchproblem

Die Simulation eines Dambruchs wird in diesem Abschnitt vorgestellt. Der Dambruch ist eine Konfiguration, bei der ein Fluid als Block auf einer Grundfläche steht

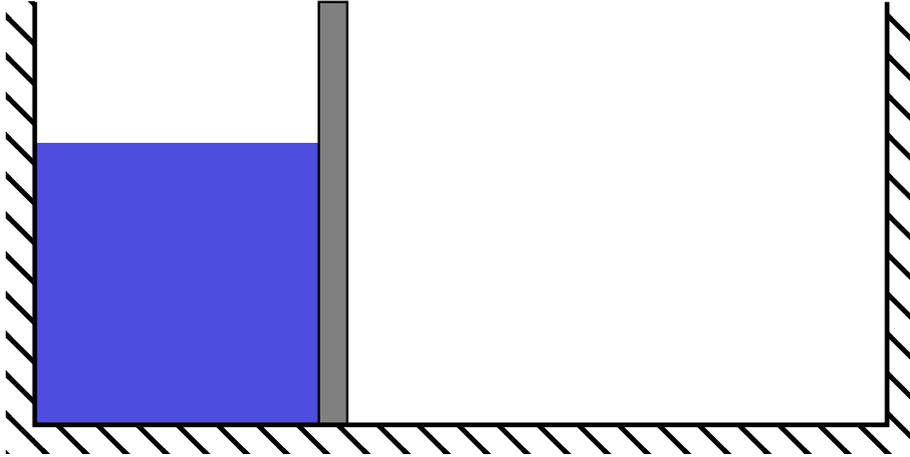


Abb. 33: Schema des Dammbruchs

und auf allen Seiten von Rändern umgeben ist, siehe Abbildung 33. Zum Simulationsbeginn wird die Trennwand (grau) entfernt, sodass sich das Fluid in diese Richtung ausbreiten kann. In dieser Richtung existiert in einiger Entfernung ein weiterer Rand, der dafür sorgt, dass das Fluid in einem fest definierten Gebiet verbleibt.

Die Berechnung eines Dammbruchs ist in der Literatur häufig zu finden. Zusätzlich existieren auch einige Experimente, mit denen die Simulation validiert werden kann. In dieser Arbeit wird der Dammbbruch mit dem Experiment von Martin und Moyce [MM], der Volume of Fluid (VoF) Methode von Sauer [Sau00] und den Simulationsergebnissen von Ulrich [UR10] verglichen. Dabei werden die Ergebnisse entdimensionalisiert dargestellt. Für die Entdimensionalisierung der Länge s wird die Gleichung

$$S = \frac{s}{b} \quad (71)$$

genutzt. Dabei ist S die dimensionslose Länge und $\frac{1}{b}$ der Faktor für die Entdimensionalisierung. Die Zeit t wird mit der Gleichung

$$Z = t \left(\frac{\|\mathbf{g}\|}{b} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (72)$$

entdimensionalisiert. Die dimensionslose Zeit wird mit Z dargestellt.

Die Startkonfiguration für diese Simulation bildet das Fluid als Würfel mit $25 \cdot 25 \cdot 25 = 15.625$ Partikel und einer Ausdehnung von $0,5m \cdot 0,5m \cdot 0,5m = 0,125m^3$. Die Dichte wird auf $\rho_i = 1.000 \frac{kg}{m^3}$ und die Masse auf $m_i = 8 \cdot 10^{-3}kg$ pro Fluidpartikel

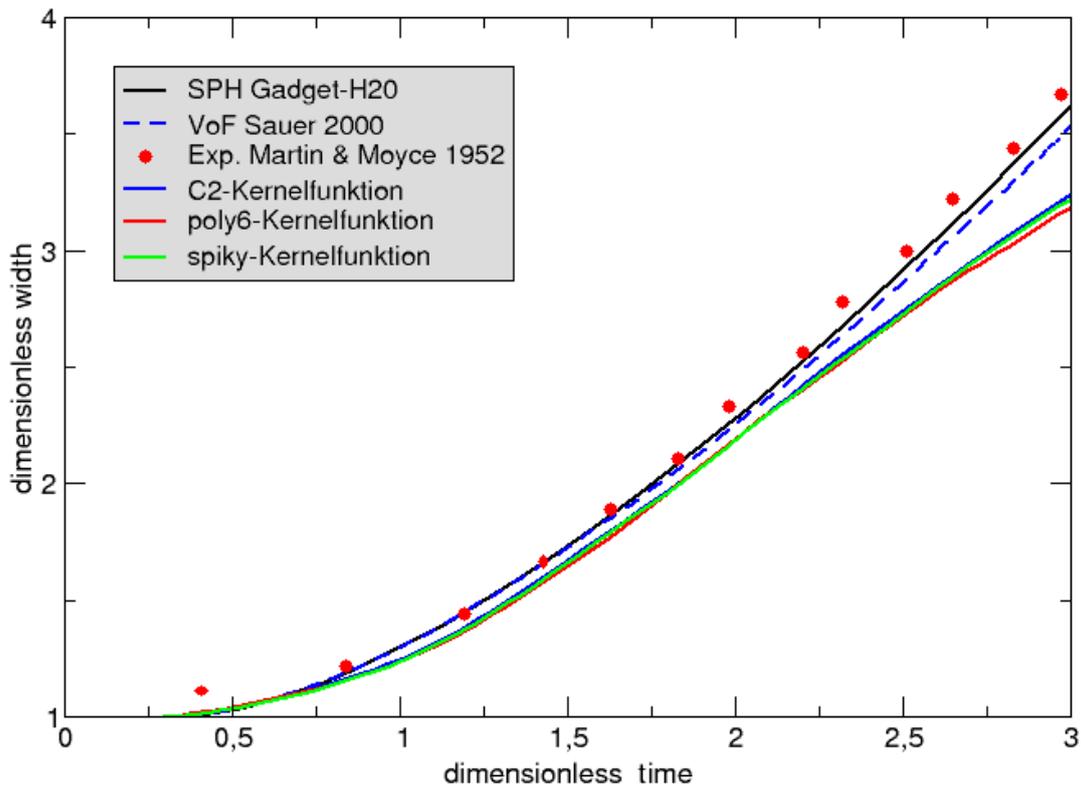


Abb. 34: Berechnete Fluidbreite der verschiedenen Kernelfunktionen im Vergleich zur numerischen Simulation mit dem Code GadgetH2O [UR10], zur numerischen VoF Referenzlösung [Sau00] und experimentellen Daten [MM]

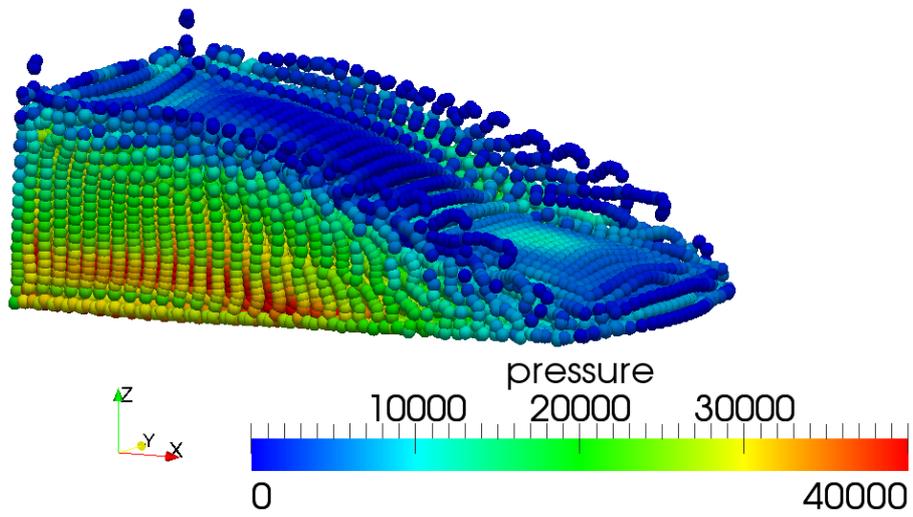
gesetzt.

Um den Vergleich des Experimentes mit den Simulationen durchzuführen, wird wie in [UR10], die Breite, welche das Fluid über die Zeit annimmt, betrachtet (siehe Abbildung 34).

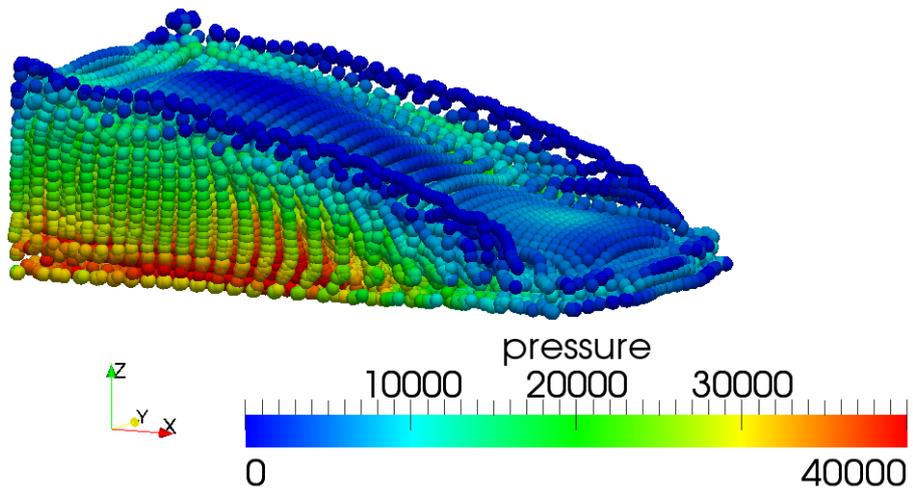
Es ist zu erkennen, dass die drei Kernelfunktionen zueinander ähnliche Ergebnisse liefern. Der Verlauf aller Kurven ist zum Simulationsbeginn ähnlich. Jedoch ist im weiteren Verlauf zu erkennen, dass die Kurven der Kernelfunktionen dieser Arbeit von den Vergleichsdaten leicht abweichen. Das geringere Ansteigen der Kurve bedeutet, dass sich das Fluid langsamer ausbreitet. Dies kann verschiedene Gründe haben: Wie schon in Kapitel 7.4 angedeutet, ist zu vermuten, dass die Randbehandlung entscheidend ist, so kann die Haftung an der Wand bei der SPH Methode dieser Arbeit zu stark wirken. Aber auch die Auflösung in der Zeit oder die Auflösung der Fluidpartikel ist nicht fein genug. Die Justierung dieser Parameter sollte in nachfolgenden Arbeiten erfolgen.

Der Verlauf der Simulation des Damnbruchs ist in den Abbildungen 35 bis 38 dargestellt. In Abbildung 38(a) ist zu erkennen, dass bei der $C2$ -Kernelfunktion ein höherer Druck vorliegt, als bei der *spiky*-Kernelfunktion. Es sind auch einige Fluidpartikel mit hohem Druck zu erkennen, die auf dem Fluid liegen. Das ist die gleiche Ungenauigkeit, die die $C2$ -Kernelfunktion beim Dichtevergleich aufgezeigt hat.

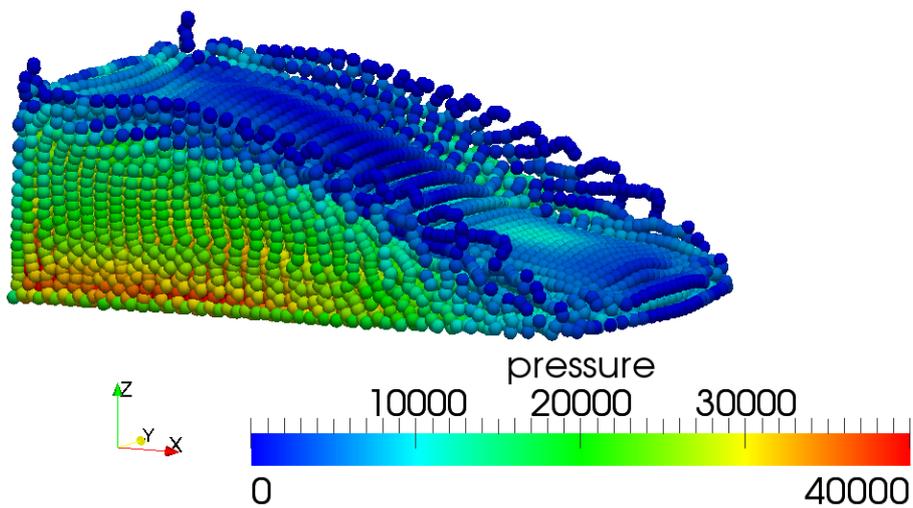
Außerdem fällt auf, dass sich bei der *poly6*-Kernelfunktion die Anzahl der Fluidpartikel scheinbar verringert, siehe Abbildung 38(b). Die *poly6*-Kernelfunktion nimmt an der Stelle $\mathbf{r} = 0$ den Wert $W_{poly6}(0, h) = \frac{315}{64\pi h^3}$ an, vgl. Abbildung 11. Dieser ist für $h \leq 1$ kleiner als bei der *spiky*- $W_{poly6}(0, h) = \frac{15}{\pi h^3}$, vgl. Abbildung 12, oder der $C2$ -Kernelfunktion $W_{C2}(0, h) = \frac{21}{2\pi h^4}$, vgl. Abbildung 13. Das bedeutet, dass die *poly6*-Kernelfunktion breiter und flacher ist als die *spiky*- und die $C2$ -Kernelfunktion. Damit hat sie kleinere Gewichte für Fluidpartikel, die sich zu nah kommen. Dadurch reichen die Gegenkräfte nicht aus, um die Fluidpartikel abzustößen. Somit sammeln sich mehrere Fluidpartikel an einzelnen Punkten. Wird diese Simulation als Animation betrachtet, dann ist zu erkennen, dass keine Fluidpartikel verschwinden, sondern dass sie sich nähern und dann zusammen die gleiche Position einnehmen. Daher sieht das Fluid ausgedünnt aus. Dieses Phänomen wird in einigen Arbeiten umgangen, indem verschiedene Kernelfunktionen für unterschiedliche Gleichungen genutzt werden (vgl. [MCG03]). Dieser Ansatz wird in dieser Arbeit nicht weiter verfolgt, da die Kernelfunktionen als Ganzes betrachtet werden sollen. Im Nachgang ist die Untersuchung von unterschiedlichen Kernelfunktionen bei den verschiedenen Gleichungen durchaus denkbar.



(a) *C2*-Kernelfunktion



(b) *poly6*-Kernelfunktion



(c) *spiky*-Kernelfunktion

Abb. 35: Dambruch nach 0,3 Sekunden (300 Iterationsschritte), Druck in *Pa*

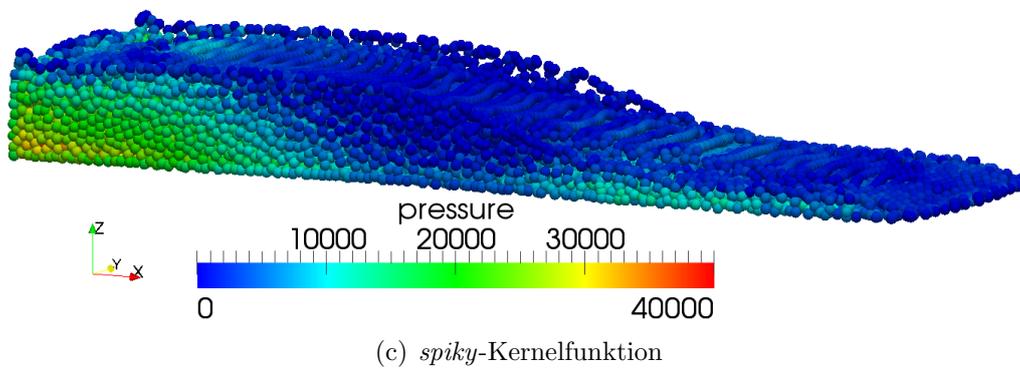
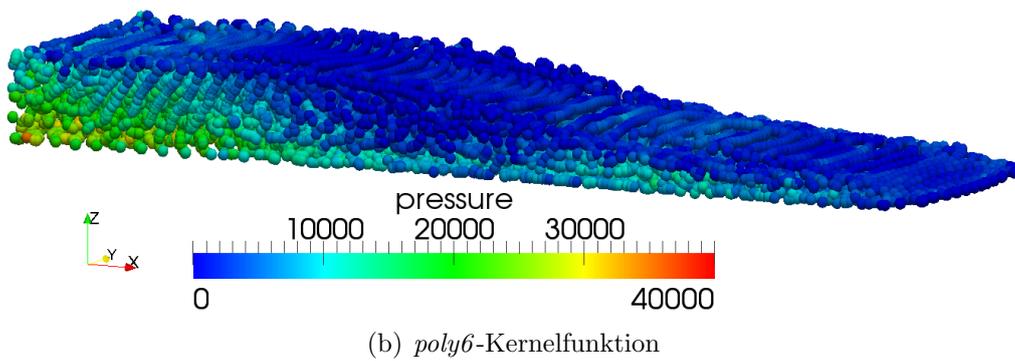
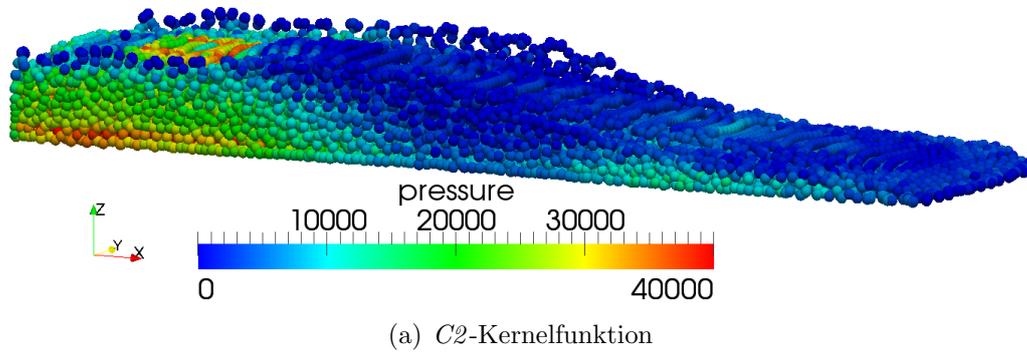
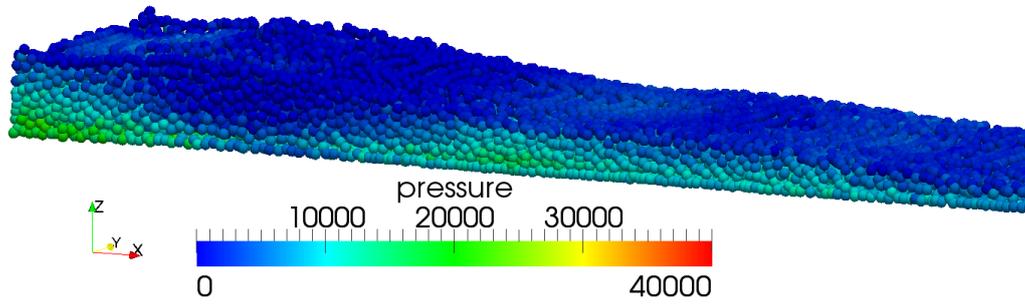
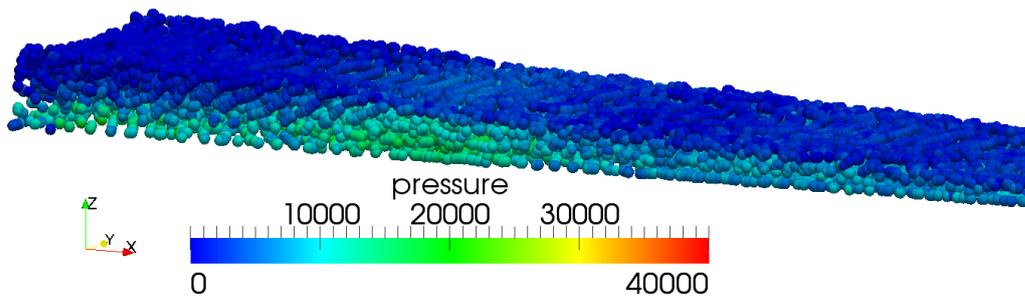


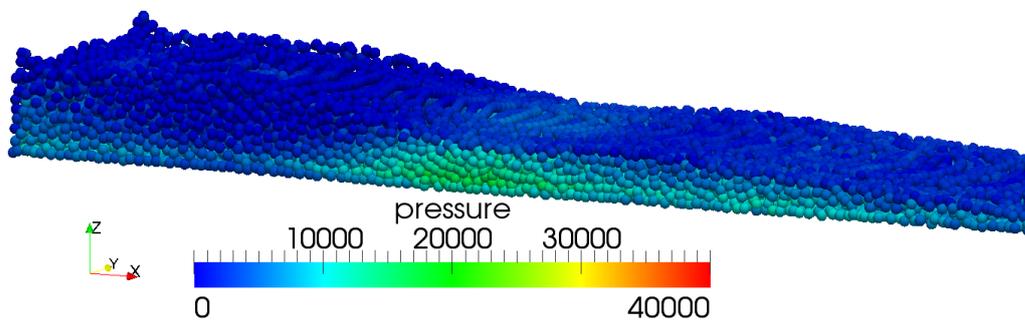
Abb. 36: Dambruch nach 0,7 Sekunden (700 Iterationsschritte), Druck in Pa



(a) *C2*-Kernelfunktion

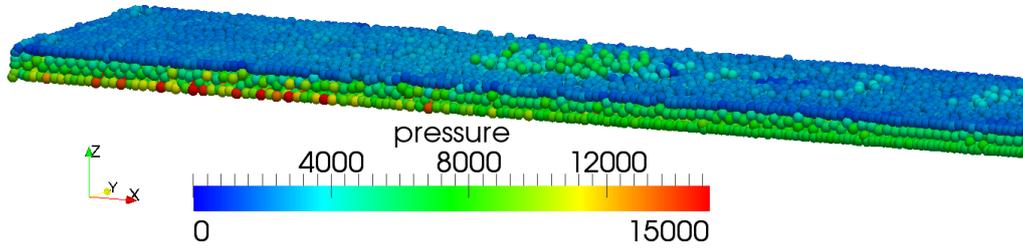


(b) *poly6*-Kernelfunktion

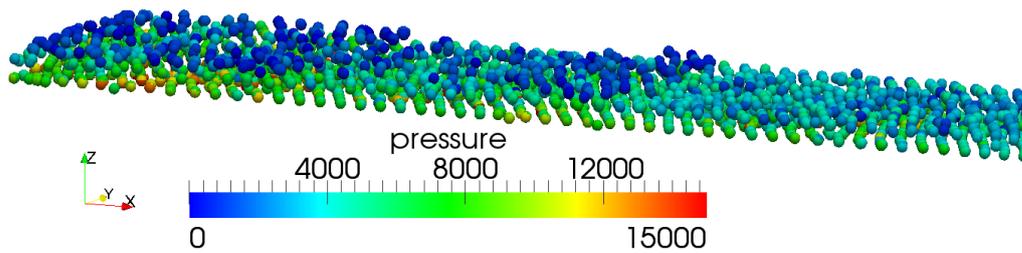


(c) *spiky*-Kernelfunktion

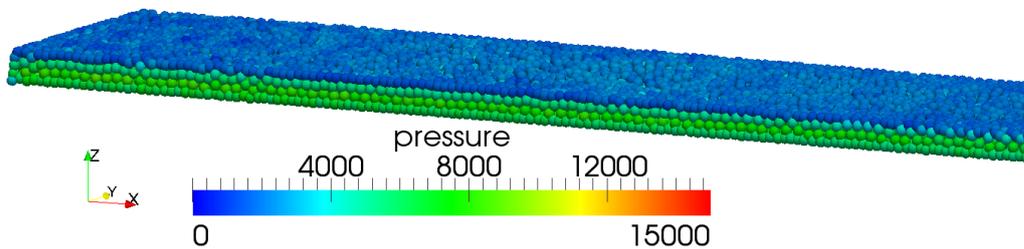
Abb. 37: Dambruch nach 1,1 Sekunden (1.100 Iterationsschritte), Druck in Pa



(a) *C2*-Kernelfunktion



(b) *poly6*-Kernelfunktion



(c) *spiky*-Kernelfunktion

Abb. 38: Dambruch nach 10 Sekunden (10.000 Iterationsschritte), Druck in Pa

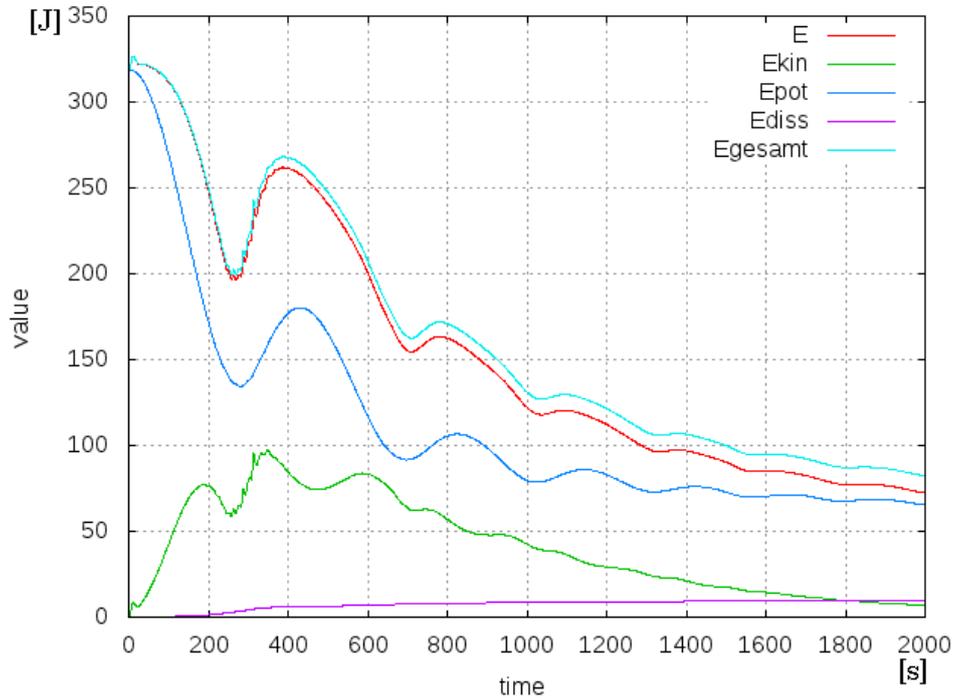


Abb. 39: Energieverlauf beim Dambruch ($C2$ -Kernelfunktion)

Der Energieverlauf des Dammbuchs für die $C2$ -Kernelfunktion (siehe Abbildung 39), die $poly6$ -Kernelfunktion (siehe Abbildung 40) und die $spiky$ -Kernelfunktion (siehe Abbildung 41) haben einen ähnlichen Verlauf. Die Energie der Simulation mit der $C2$ -Kernelfunktion weist jedoch ein Schwingen zwischen den Zeitschritten 250 und 350 auf, das auch schon bei der Randanalyse in Kapitel 7 zu sehen ist. Somit ist diese Störung auf die $C2$ -Kernelfunktion zurückzuführen. Um die Ungenauigkeit zu beheben, könnte noch eine Variation der Zeitschrittweite oder der Auflösung durch die Fluidpartikelgröße und Fluidpartikelanzahl untersucht werden.

Die $spiky$ -Kernelfunktion weist bei der Parameterwahl, welche in dieser Arbeit vorgenommen ist, die besten Simulationsergebnisse für den Dambruch auf. Sie ähnelt am besten der Dirac-Delta-Funktion, denn im Vergleich zu den anderen Kernelfunktionen hat sie einen größeren Wert an der Stelle $\mathbf{r}_{ij} = 0$, dadurch ist sie schmal und liefert somit die größere Gewichte für nahe Fluidpartikel.

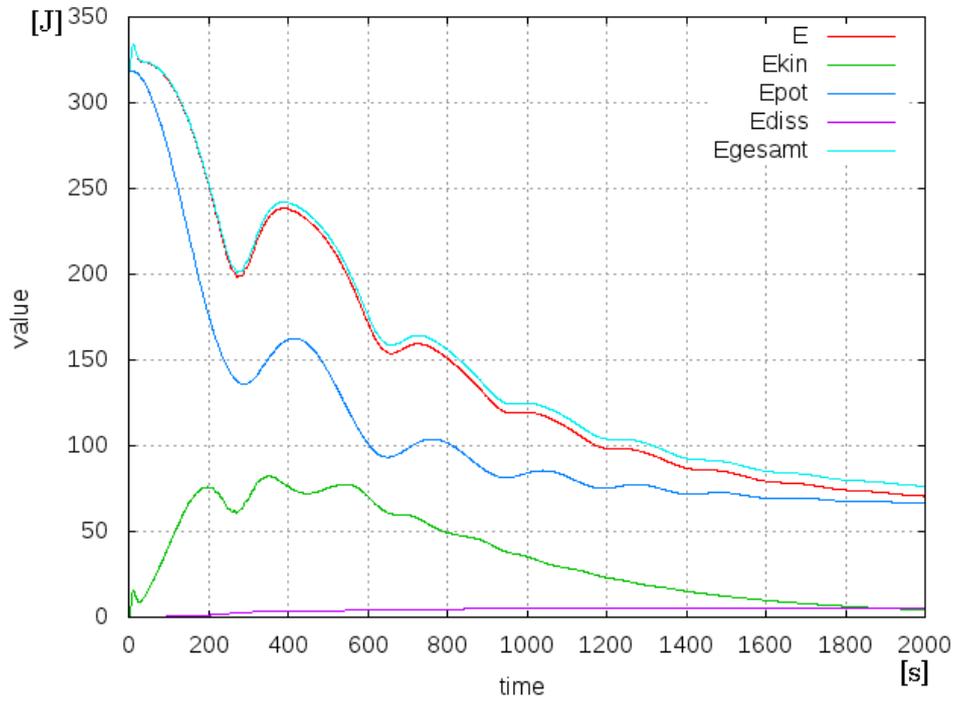


Abb. 40: Energieverlauf beim Dambruch (*poly6*-Kernelfunktion)

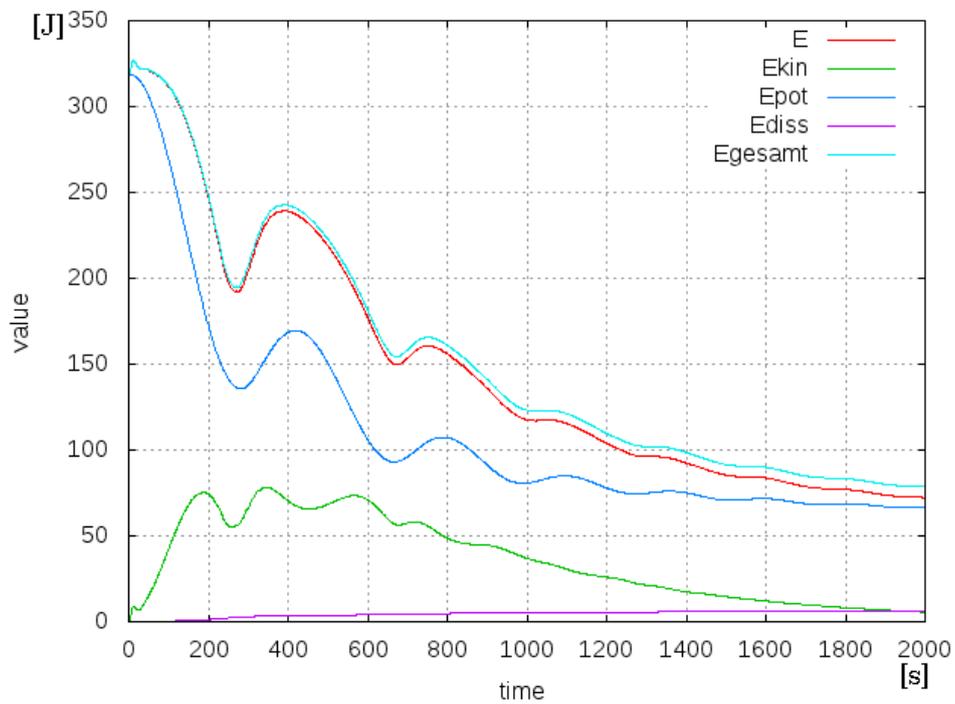


Abb. 41: Energieverlauf beim Dambruch (*spiky*-Kernelfunktion)

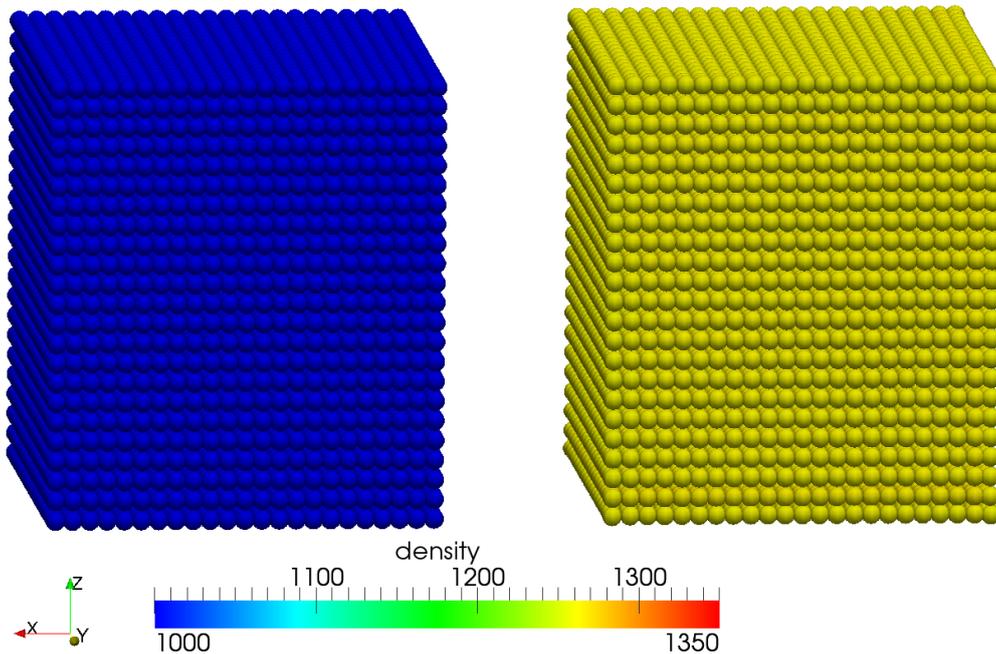


Abb. 42: Startkonfiguration von zwei Medien, Dichte in $\frac{kg}{m^3}$

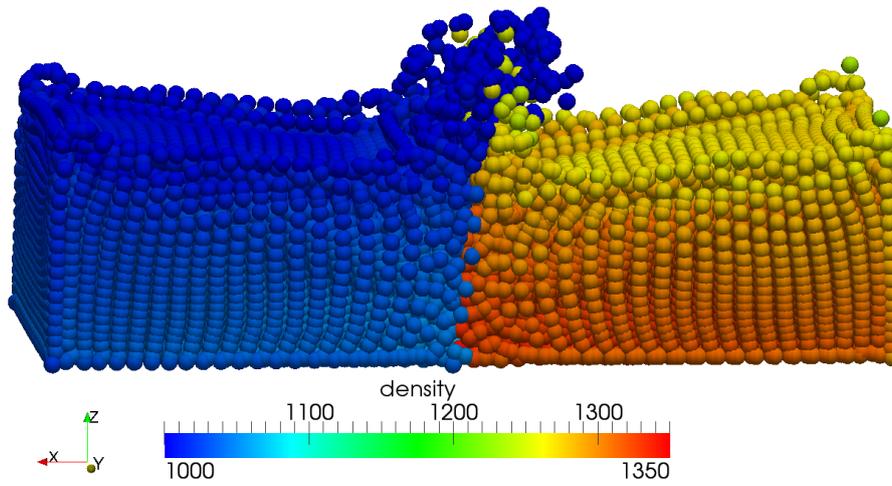
8.3 Kernelfunktionen bei verschiedenen Medien

In diesem Abschnitt wird die Simulation von zwei verschiedenen Medien vorgestellt. Das eine Medium soll wie bisher Wasser mit einer Dichte von $\rho_i = 1.000 \frac{kg}{m^3}$ repräsentieren und das andere Medium bekommt die Dichte $\rho_i = 1.260 \frac{kg}{m^3}$ von Glycerin zugewiesen. Diese beiden Fluide werden nebeneinander in einen Behälter plaziert, und danach wird die Simulation gestartet. Es wird erwartet, dass das Glycerin, also das schwerere Fluid, sich unter das Wasser bewegt, wobei das links befindliche Fluid in der Abbildung 42 mit der geringen Dichte das Wasser darstellt und sich rechts der Glycerinblock befindet. In diesen Darstellungen ist die Dichte der Fluidpartikel farbkodiert dargestellt, um die beiden Medien besser voneinander abzugrenzen.

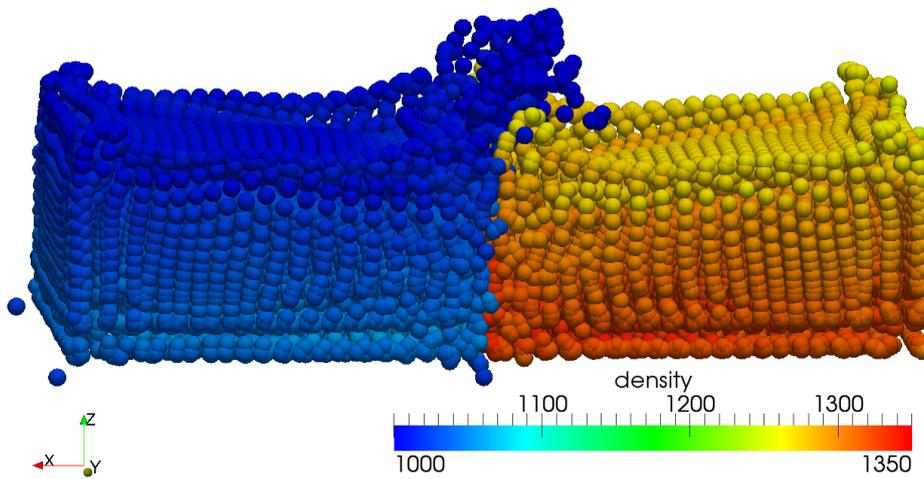
Die Startkonfiguration dieser Simulation ist in Abbildung 42 dargestellt. Die beiden Fluide werden jeweils von $23 \cdot 20 \cdot 23 = 10.580$ Partikeln mit einer Ausdehnung von $0,46m \cdot 0,4m \cdot 0,46m = 0,08464m^3$ und einer Masse von $m_i = 8 \cdot 10^{-3}kg$ pro Fluidpartikel repräsentiert. Das ergibt jeweils ein Volumen von $84,64l$. Zwischen den beiden Fluiden ist ein Freiraum mit einer Länge von $0,16m$ gelassen. Für den umgebenden Behälter ergibt sich somit eine Grundfläche von $0,96m \cdot 0,46m = 0,4416m^2$, wobei die Höhe auf $1m$ festgelegt ist.

In den Abbildungen 43 und 44 sind die Simulationen mit den drei verschiedenen Kernelfunktionen nach 0,3 Sekunden und nach 1,5 Sekunden dargestellt. Bei der Simulation mit der *poly6*-Kernelfunktion ist wiederum das Ausdünnen zu erkennen. Wie im vorherigen Anwendungsfall ist die Simulation mit der *poly6*-Kernelfunktion auch in diesem Fall instabil und bricht nach weniger als 2.000 Iterationen ab. In Abbildung 44(b) scheinen einige Fluidpartikel das Simulationsgebiet zu verlassen. Dies ist jedoch nicht der Fall, sie dringen in den Rand ein und werden dort festgehalten. Die anderen beiden Kernelfunktionen bleiben stabil. Die Abbildungen 45 und 46 zeigen den weiteren Verlauf der zugehörigen Simulationen.

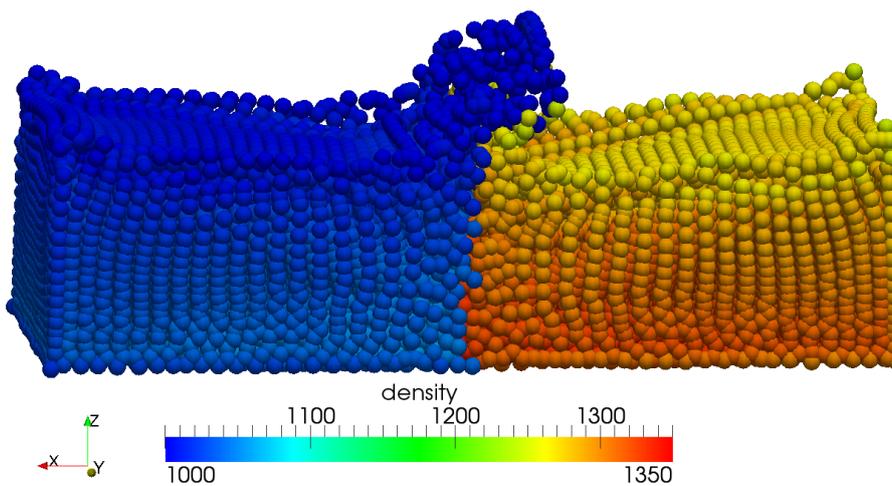
Die Fluidpartikel, welche das Glyzerin repräsentieren, schieben sich wie erwartet aufgrund ihrer höheren Dichte unter die anderen Fluidpartikel. In den Abbildungen 47 und 48 wird der Energieverlauf der *C2*- und der *spiky*-Kernelfunktion dargestellt. Dabei ist die Störung, die sonst mit der *C2*-Kernelfunktion aufgetreten ist, nicht vorhanden. Ansonsten ist kein qualitativer Unterschied zwischen diesen beiden Kernelfunktionen zu erkennen.



(a) *C2*-Kernelfunktion

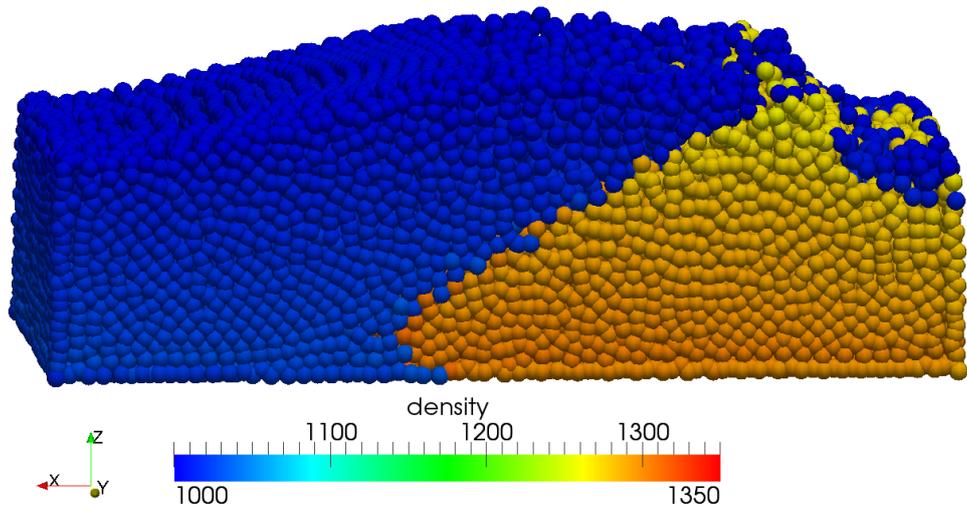


(b) *poly6*-Kernelfunktion

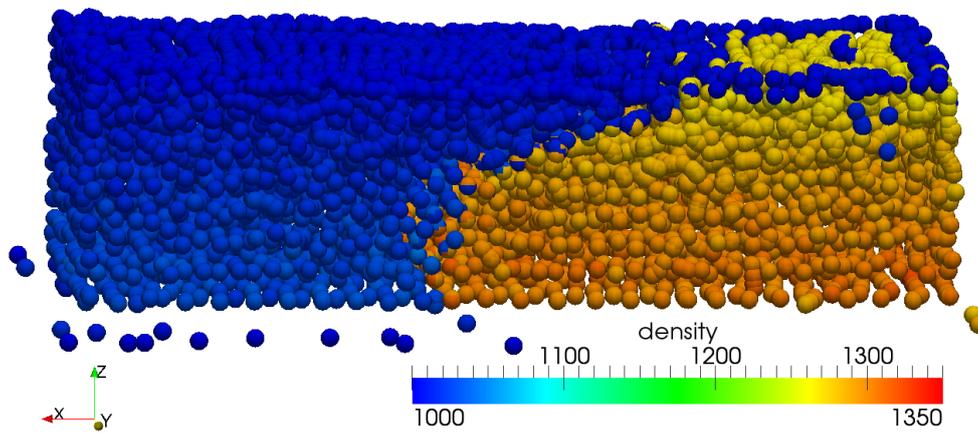


(c) *spiky*-Kernelfunktion

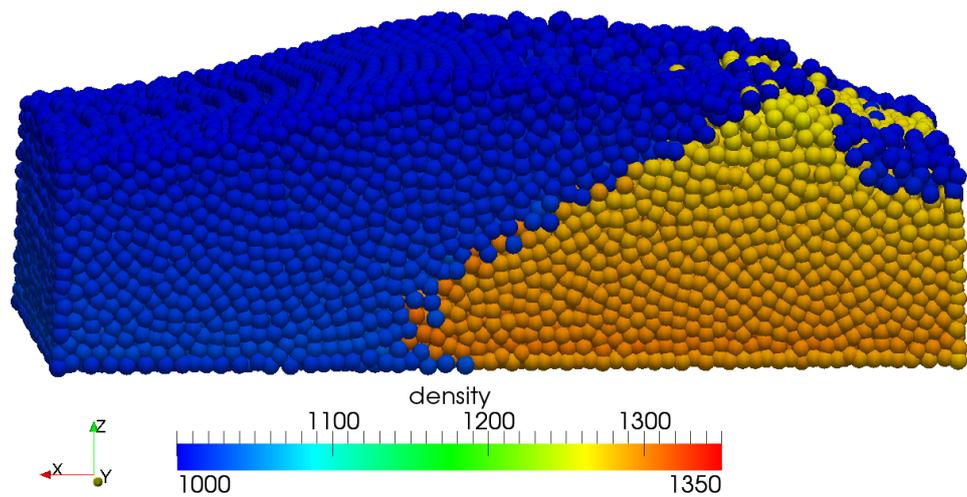
Abb. 43: Zwei Medien nach 0,3 Sekunden (300 Iterationsschritte), Dichte in $\frac{kg}{m^3}$



(a) *C2*-Kernelfunktion



(b) *poly6*-Kernelfunktion



(c) *spiky*-Kernelfunktion

Abb. 44: Zwei Medien nach 1,5 Sekunden (1.500 Iterationsschritte), Dichte in $\frac{kg}{m^3}$

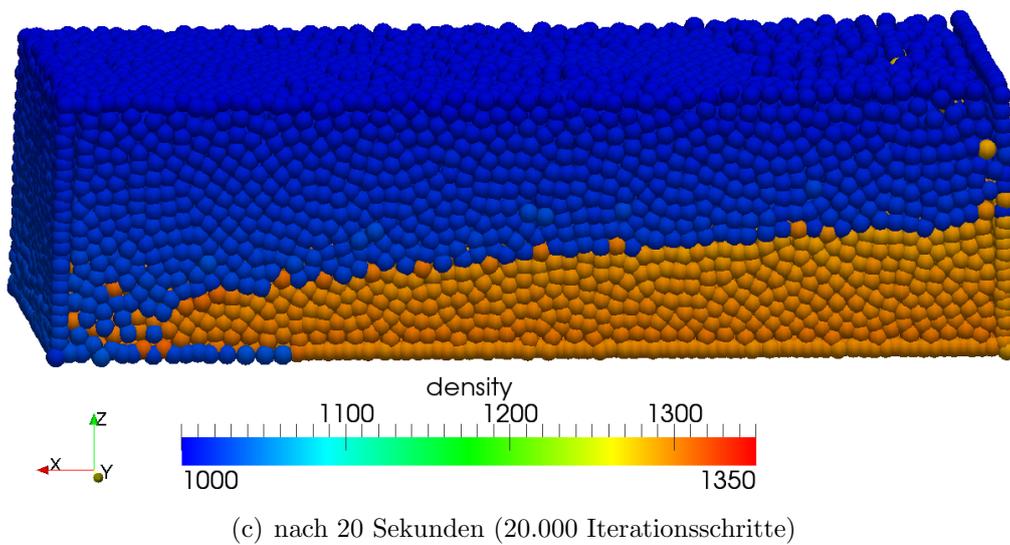
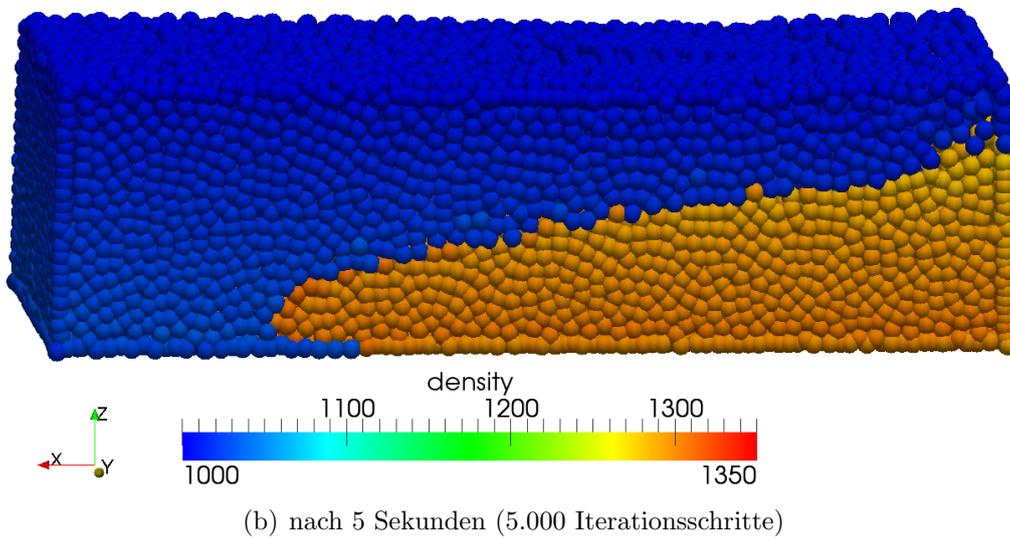
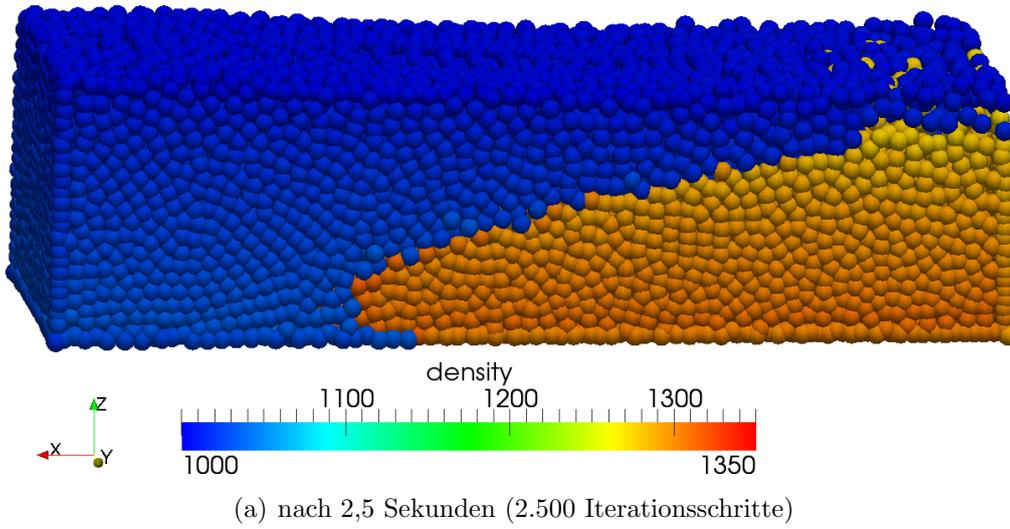
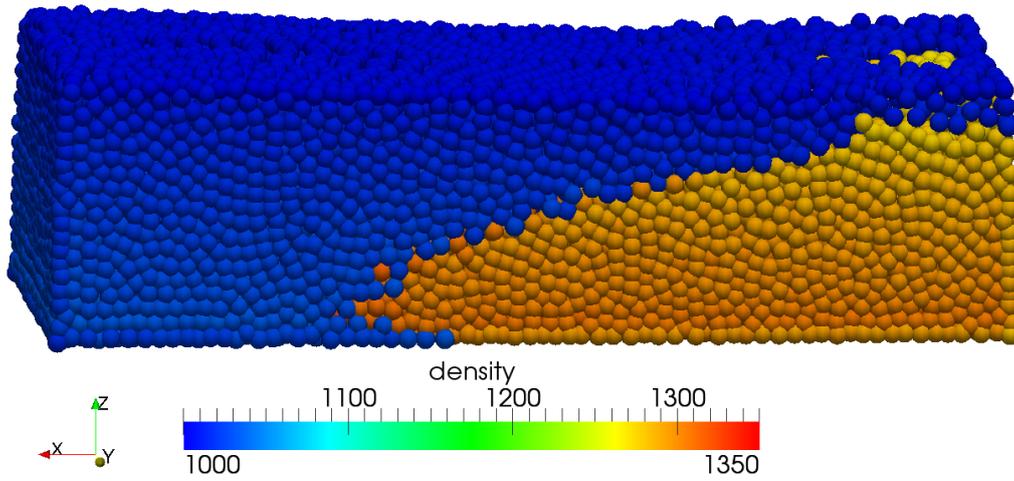
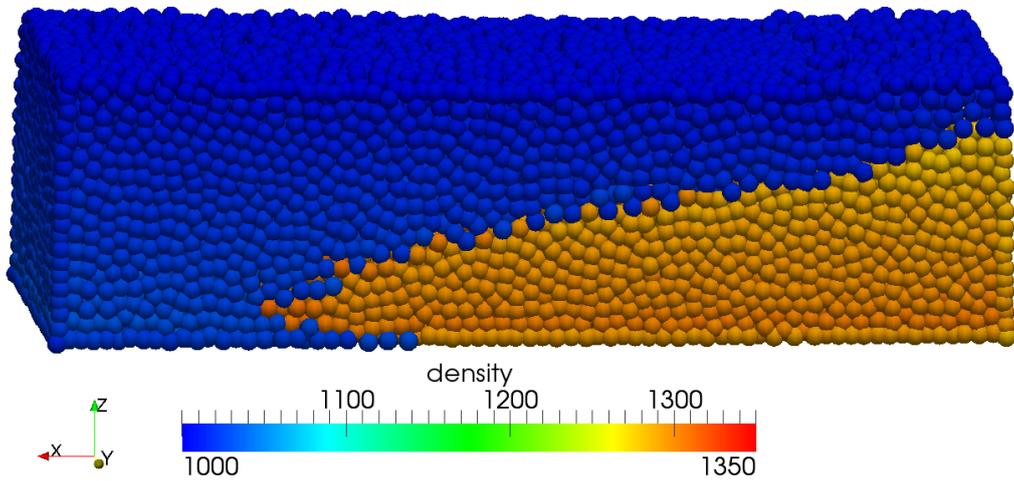


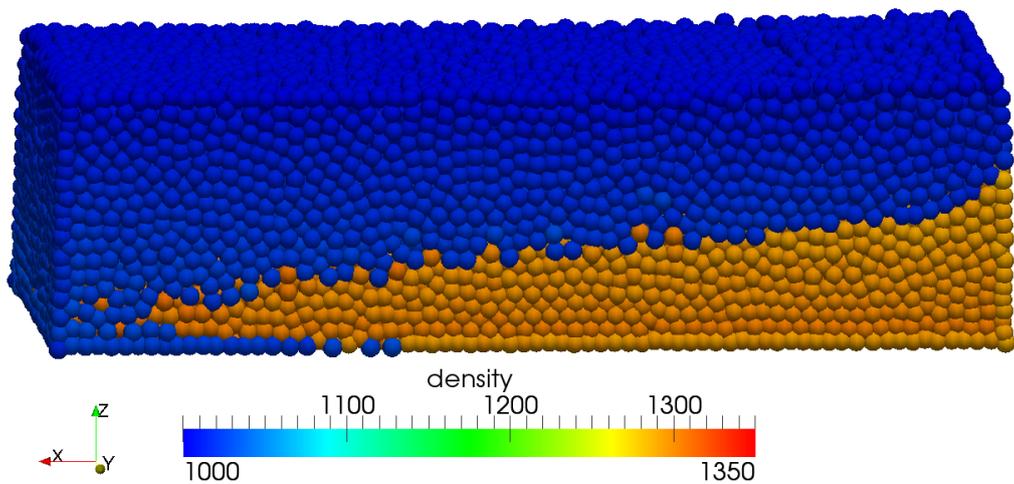
Abb. 45: Zwei Medien mit $C2$ -Kernelfunktion, Dichte in $\frac{kg}{m^3}$



(a) nach 2,5 Sekunden (2.500 Iterationsschritte)



(b) nach 5 Sekunden (5.000 Iterationsschritte)



(c) nach 20 Sekunden (20.000 Iterationsschritte)

Abb. 46: Zwei Medien mit *spiky*-Kernelfunktion, Dichte in $\frac{kg}{m^3}$

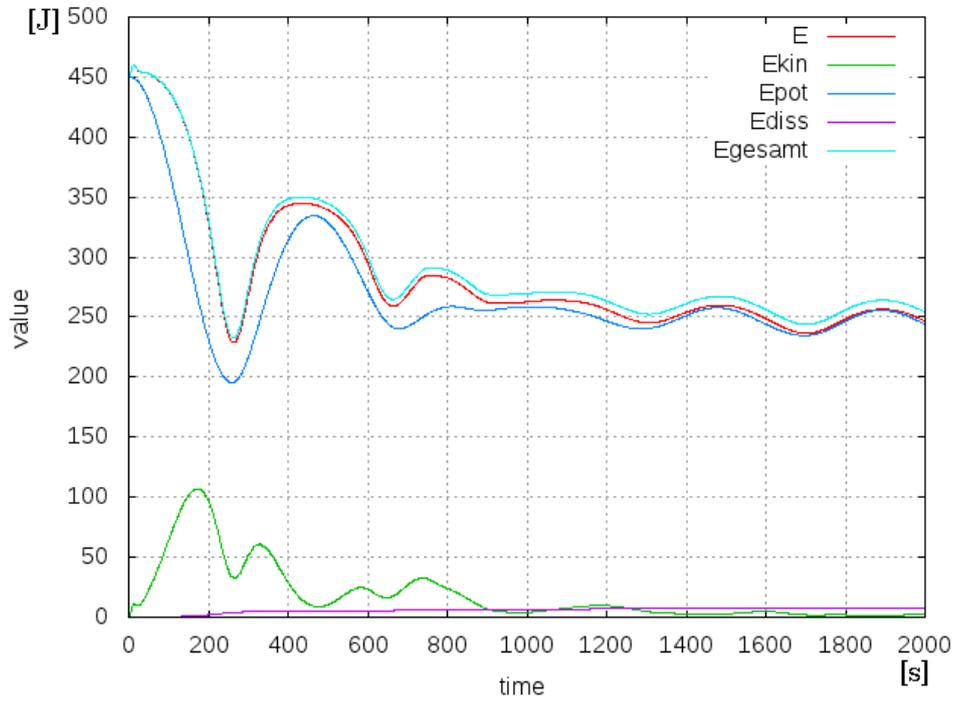


Abb. 47: Energieverlauf bei zwei Medien ($C2$ -Kernelfunktion)

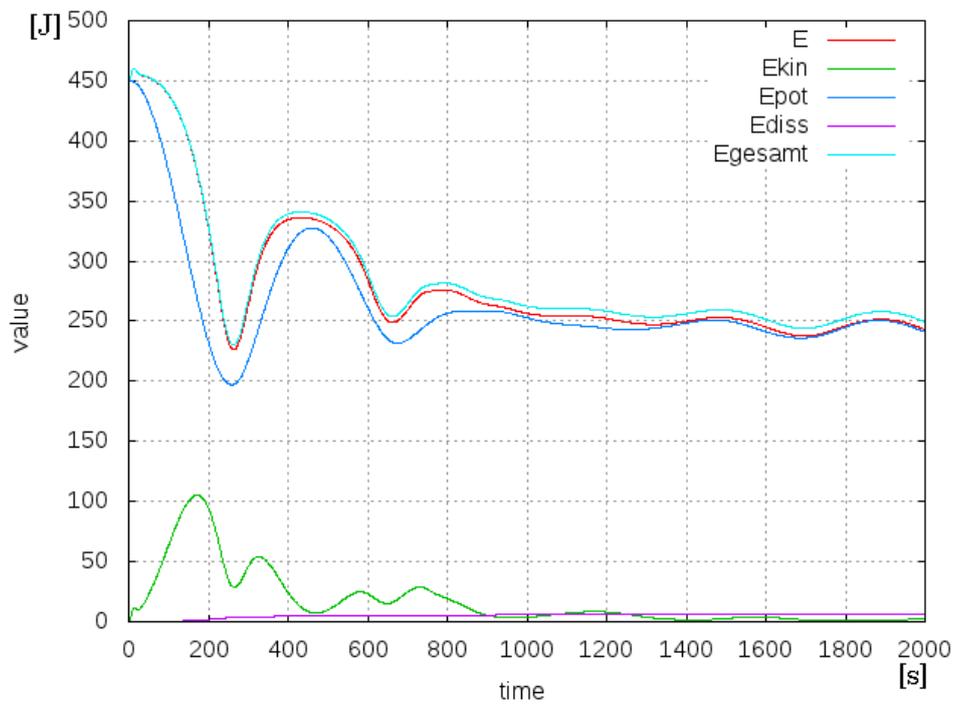


Abb. 48: Energieverlauf bei zwei Medien ($spiky$ -Kernelfunktion)

8.4 Bewertung der Ergebnisse

In der Tabelle 5 werden die Ergebnisse der Simulationen aus den vorangegangenen Abschnitten zusammengefasst. Die Anwendung der $C2$ -Kernelfunktion liefert beim Dammbuch und bei den zwei Medien eine stabile Simulation. Jedoch ist beim Dammbuch eine Störung im Energieverlauf zu erkennen und bei der Dichtebetrachtung ist die Simulation mit der $C2$ -Kernelfunktion instabil.

Die $poly6$ -Kernelfunktion weist bei keinem Anwendungsfall eine stabile Simulation auf und hat das Problem, dass Fluidpartikel die Position anderer Partikel erreichen und somit gleiche Positionen einnehmen.

Die Anwendung der $spiky$ -Kernelfunktion führt zu einer stabilen Simulation in allen Anwendungsfällen und es treten keine Störungen im Energieverlauf wie bei der $C2$ -Kernelfunktion auf.

Tabelle 5: Analyse der untersuchten Kernelfunktionen

Anwendungsfall	$C2$	$poly6$	$spiky$
Dichteänderung	- instabil	- instabil	- stabil
Dammbuch	- stabil - Störungen im Energieverlauf	- instabil - Partikel auf einer Position	- stabil
zwei Medien	- stabil	- instabil - Partikel auf einer Position	- stabil

Unter Anwendung des Algorithmus aus Kapitel 3, mit dem Partikelvolumen von $V_i = (0,02m)^3$ und der Zeitschrittweite $\Delta t = 10^{-3}s$ hat sich die $spiky$ -Kernelfunktion als stabilste unter den untersuchten Kernelfunktionen herausgestellt. Mit der in Kapitel 7 ermittelten Randbehandlung und der $spiky$ -Kernelfunktion lassen sich stabile Simulationen über einen langen Zeitraum durchführen.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit ist die Analyse verschiedener Kernelvariationen für die SPH Methode. Die Methode selbst wurde für die vorliegende Arbeit implementiert. Die zu analysierenden Kernelfunktionen sind C^2 -, *poly6*- und *spiky*-Kernelfunktion. Dabei hat sich herausgestellt, dass die *spiky*-Kernelfunktion für alle untersuchten Anwendungsfälle am ehesten geeignet ist. Aussagekräftige Ergebnisse werden bei Simulationen mit dieser Kernelfunktion erreicht.

Eine ausreichend stabile Randbehandlung ist für die Analyse von Kernelfunktionen notwendig. Daher wurde in Kapitel 7 eine Untersuchung verschiedener Randbehandlungen durchgeführt. Es wurden der elastische Stoß und unterschiedliche Arten von Randbehandlungen mit Wandpartikeln betrachtet. Dabei hat sich herausgestellt, dass jede Art der Randmodellierung Vor-, sowie Nachteile besitzt. Aus diesem Grund wurde eine Kombination zweier Ansätze vorgenommen, der die Vorteile vereint und die Nachteile wegfallen lässt. Die Kombination besteht aus den Wandpartikeln mit einer modifizierten Dichteberechnung und dem elastischen Stoß. Mit diesem Rand, der die geforderte Stabilität besitzt und eine lange Simulationsdauer ermöglicht, erfolgte die Analyse der Kernelfunktionen im Kapitel 8 anhand der Simulation verschiedener Anwendungsfälle.

Die SPH Methode ist ein schwach kompressibles Verfahren. Die Fluidpartikel erfahren bei der Simulation eine Dichteänderung. Um den Anteil der Dichteänderung bei der SPH Methode zu ermitteln, wurde ein Testfall in Anlehnung an die Arbeit [BLS12] aufgesetzt. Bei der Simulation hat sich herausgestellt, dass die transportierte Dichte von der Dichte abweicht, die sich durch die Masse pro Volumen berechnet. Diese wiederum kann mehr oder weniger stark von der Realität abweichen. In diesem Zusammenhang wurde untersucht, ob die Variation der Fluidtiefe einen Unterschied bei der Dichtebetrachtung bewirkt. Dies ist jedoch nicht der Fall. Bei dieser Simulation hat nur die *spiky*-Kernelfunktion eine stabile Lösung ergeben.

Als weiterer Anwendungsfall erfolgte die Simulation eines Dammbbruchs. Für diesen Fall wurden die Daten von anderen Implementierungen und eines Experimentes herangezogen, um die Genauigkeit der Implementierung dieser Arbeit zu validieren. Außerdem sollte festgestellt werden, ob die Genauigkeit der Ergebnisse von der genutzten Kernelfunktion abhängt. Es stellte sich heraus, dass die Variation der Kernelfunktionen keine erheblichen Unterschiede innerhalb des betrachteten Zeitrahmens aufweist. Die Untersuchung des Dammbbruchs über ein längeres Zeitintervall zeigt Instabilitäten bei der *poly6*-Kernelfunktion und Ungenauigkeiten bei der *C2*-Kernelfunktion. Die *spiky*-Kernelfunktion ist vom Verlauf spitzer und schmaler als die beiden anderen und somit ähnelt sie eher der Dirac-Delta-Funktion, welche die Kernelfunktionen approximieren sollen.

Zuletzt wurde das Mischverhalten zweier verschiedener Medien, Wasser und Glycerin, simuliert. Dabei wurde das erwartete Ergebnis erzielt, wobei sich das schwerere Medium unter das leichtere schiebt. Auch bei diesen Simulationen ist bei der *poly6*-Kernelfunktion die Instabilität aufgetreten. Die Simulationen mit der *C2*- und der *spiky*-Kernelfunktion blieben über einen langen Zeitraum stabil.

Abschließend lässt sich feststellen, dass die *spiky*-Kernelfunktion bei den hier betrachteten Simulationen die besten Ergebnisse erzielt. Außerdem wurde aufgezeigt, dass mit der SPH Methode unterschiedliche Simulationen möglich sind.

Obwohl viele Bereiche der SPH Methode in dieser Arbeit betrachtet wurden, bietet dieses Verfahren noch viele weitere interessante Aspekte. Die Anzahl der Fluidpartikel wird innerhalb dieser Arbeit als konstant angesehen, was jedoch nicht der Fall sein muss. Es ist vorstellbar, dass die Auflösung in bestimmten Bereichen variiert werden muss, um starke lokale Gradienten aufzulösen. Dazu ist eine automatisierte Verfeinerungsstrategie vorteilhaft. Dieses ist, ebenso wie bewegte Ränder, aktuelles Forschungsthema und bietet viele weitere Forschungsmöglichkeiten für die Untersuchung von Kernelfunktionen. Weiterhin werden in der Literatur teilweise verschiedene Kernelfunktionen für die unterschiedlichen Gleichungen genutzt. Somit verbleibt die Untersuchung der daraus entstehenden Variationen.

Weiterhin ist es möglich, den Einfluss der Turbulenz während der Simulation zu untersuchen. Bisher wurde die Temperatur konstant betrachtet. Diese Einschränkung sollte in folgenden Arbeiten aufgehoben werden, indem der Temperaturtransport mittels Konduktion, Konvektion und Strahlung berücksichtigt wird. Somit ergeben sich viele neue Anwendungsmöglichkeiten der SPH Methode, wie zum Beispiel die

Betrachtung des thermischen Auftriebs.

Durch die Einführung eines statischen Drucks als zusätzliche Transportgröße kann die Dichte des Systems konstant gesetzt werden. Somit besteht die Möglichkeit, die SPH Methode echt inkompressibel zu gestalten. Wie die Energiebilanzen gezeigt haben, wird die Energie des Systems teilweise von der Wand absorbiert. Eine Betrachtung dieser Energieanteile kann Aussagen darüber zu Tage bringen, ob bei der Modellierung der Energieerhaltungssatz gilt.

Obgleich nur ein kleiner Teil des Partikelverfahrens im Rahmen dieser Arbeit vorgestellt werden konnte, lässt sich abschließend feststellen, dass die SPH Methode viel Potential in der numerischen Strömungsmechanik bietet.

Literaturverzeichnis

- [Aue08] AUER, Stefan: *Partikelbasierte Echtzeit-Fluidsimulation Realtime particle-based fluid simulation*, Technische Universität München, Masterarbeit, 2008
- [Ben75] BENTLEY, Jon L.: Multidimensional binary search trees used for associative searching. In: *Commun. ACM* 18 (1975), September, S. 509–517. – ISSN 0001–0782
- [Bis06] BISHOP, C. M.: *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer, 2006. – ISBN 978–0387310732
- [BLS12] BODIN, Kenneth ; LACOURSIERE, Claude ; SERVIN, Martin: Constraint Fluids. In: *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 18 (2012), S. 516–526. – ISSN 1077–2626
- [Böh00] BÖHME, Gert: *Strömungsmechanik nichtnewtonscher Fluide*. Teubner, 2000 (Leitfäden der angewandten Mathematik und Mechanik)
- [BSMM05] BRONSTEIN, I. N. ; SEMENDJAJEW, K. A. ; MUSIOL, G. ; MÜHLIG, H.: *Taschenbuch der Mathematik*. 6. Auflage. Verlag Harri Deutsch, 2005
- [CBP05] CLAVET, Simon ; BEAUDOIN, Philippe ; POULIN, Pierre: Particle-based Viscoelastic Fluid Simulation. In: *Symposium on Computer Animation 2005*, 2005, S. 219–228
- [Ell04] ELLERO, Marco: *Smoothed Particle Dynamics Methods for the Simulation of Viscoelastic Fluids*, Technische Universität Berlin, Diss., 2004
- [Erl10] ERLEBEN, Kenny: *Smoothed Particle Hydrodynamics A short Introduction to Principles and Ideas*, 2010

- [GGRD⁺10] GÓMEZ-GESTEIRA, M. ; ROGERS, B.D. ; DALRYMPLE, R.A. ; CRESPO, A.J.C. ; NARAYANASWAMY, M.: *User Guide for the SPHysics Code v2.0*. 1, 2010. <http://www.sphysics.org>
- [GM77] GINGOLD, R. A. ; MONAGHAN, J. J.: Smoothed particle hydrodynamics - Theory and application to non-spherical stars. In: *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* 181 (1977), November, S. 375–389
- [Gun12] GUNDLACH, Janto: *Multiregional Fluid-Structure-Interaction-Analysis concerning Damping Features of Viscous Fluids*, Universität Kassel, Diplomarbeit, 2012
- [HKK07] HARADA, Takahiro ; KOSHIZUKA, Seiichi ; KAWAGUCHI, Y: Improvement in the Boundary Conditions of Smoothed Particle Hydrodynamics. In: *Computer Graphics Geometry* 9 (2007), Nr. 3, S. 2–15
- [IAGT10] IHMSEN, Markus ; AKINCI, Nadir ; GISSLER, Marc ; TESCHNER, Matthias: Boundary Handling and Adaptive Time-stepping for PCISPH. In: *VRIPHYS*, 2010, S. 79–88
- [Kle04] KLEY, Wilhelm: *Numerische Hydrodynamik*. 2004
- [Krö97] KRÖNER, Dietmar: *Numerical Schemes for Conservation Laws*. Wiley and Teubner, 1997
- [Kün09] KÜNEMUND, Jens: *Hybride unstrukturierte Netzgenerierung mit Hexaeder basierten Fernfeldnetzen*. Bachelorarbeit, 2009
- [LR11] LÓPEZ, Yaidel R. ; ROOSE, Dirk: Dynamic refinement for fluid flow simulations with SPH. In: *Particle-based Method II. Fundamentals and Applications*, 2011
- [LRK11] LÓPEZ, Yaidel R. ; ROOSE, Dirk ; KM, Camajuaní: Particle refinement for fluid flow simulations with SPH. In: *Methods* V (2011), Nr. May
- [Luc77] LUCY, L. B.: A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. In: *Astron. J.* 82 (1977), Dezember, S. 1013–1024
- [Mad08] MADLENER, David: *Numerische Simulation von protostellaren Scheiben mit Treecodes und Smoothed Particle Hydrodynamics*, Universität Köln, Diplomarbeit, 2008

- [MCG03] MÜLLER, Matthias ; CHARYPAR, David ; GROSS, Markus: Particle-based fluid simulation for interactive applications. In: *Proceedings of the 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation*. Aire-la-Ville, Switzerland, Switzerland: Eurographics Association, 2003 (SCA '03). – ISBN 1-58113-659-5, S. 154–159
- [MFZ97] MORRIS, Joseph P. ; FOX, Patrick J. ; ZHU, Yi: Modeling Low Reynolds Number Incompressible Flows Using SPH. In: *Journal of Computational Physics* 136 (1997), September, Nr. 1, S. 214–226. – ISSN 00219991
- [MK09] MONAGHAN, J. J. ; KAJTAR, J. B.: SPH particle boundary forces for arbitrary boundaries. In: *Computer Physics Communications* 180 (2009), Nr. 10, S. 1811 – 1820. – ISSN 0010-4655
- [MM] MARTIN, J. C. ; MOYCE, W. J.: Part IV. An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plane. In: *Mathematical and Physical Sciences* 244, S. 312–324
- [Mon92] MONAGHAN, J. J.: Smoothed particle hydrodynamics. In: *Annual review of astronomy and astrophysics* 30 (1992), S. 543–574
- [Mon94] MONAGHAN, J. J.: Simulating free surface flows with SPH. In: *J. Comput. Phys.* 110 (1994), February, S. 399–406. – ISSN 0021-9991
- [Mon12] MONAGHAN, J. J.: Smoothed Particle Hydrodynamics and its Diverse Applications. In: *Fluid Mechanics* 44 (2012), S. 323–346
- [Moo91] MOORE, Andrew: *Efficient Memory-based Learning for Robot Control*, Robotics Institute, Carnegie Mellon University, Diss., March 1991
- [MST04] MÜLLER, Matthias ; SCHIRM, Simon ; TESCHNER, Matthias: Interactive blood simulation for virtual surgery based on smoothed particle hydrodynamics. In: *Technol. Health Care* 12 (2004), February, S. 25–31. – ISSN 0928-7329
- [Oer95] OERTEL, Herbert: *Strömungsmechanik, Methoden und Phänomene*. Springer Verlag, 1995. – ISBN 3540570071

- [OW12] OTTMANN, T. ; WIDMAYER, P.: *Algorithmen Und Datenstrukturen*. Spektrum Akademischer Verlag, 2012. – ISBN 9783827428035
- [Pap09] PAPULA, Lothar: *Mathematische Formelsammlung für Ingenieure und Naturwissenschaftler ; mit zahlreichen Rechenbeispielen und einer ausführlichen Integraltafel*. Wiesbaden : Vieweg und Teubner, 2009. – ISBN 978-3-8348-0757-1
- [Pfa04] PFAFF, Ben: Performance analysis of BSTs in system software. In: *SIGMETRICS*, 2004, S. 410–411
- [RMH⁺97] REICHL, P. J. ; MORRIS, P. ; HOURIGAN, K. ; THOMPSON, M. C. ; STONEMAN, S. A. T.: Coating flow simulations using smooth particle hydrodynamics. In: *Proceedings of the International Conference on Computational Fluid Dynamics in Mineral and Metal Processing and Power Generation (1997)*, S. 345–352
- [Sau00] SAUER, Jürgen: *Instationär kavitierende Strömungen - Ein neues Modell, basierend auf Front Capturing (VoF) und Blasendynamik*, Universität Karlsruhe, Diss., 2000
- [Sch09] SCHRÄDER, Daniela: *Analytically Divergence-free Discretization Methods for Darcy's Problem*, University of Sussex, Diss., 2009
- [Spu93] SPURK, J. H.: *Strömungslehre: Eine Einführung in die Theorie der Strömungen*. 3. Auflage. Springer, 1993
- [STC04] SHAWE-TAYLOR, John ; CRISTIANINI, Nello: *Kernel Methods for Pattern Analysis*. Cambridge University Press, 2004. – ISBN 978-0521813976
- [SW06] SCHABACK, Robert ; WENDLAND, Holger: Kernel techniques: From machine learning to meshless methods. In: *Acta Numerica* 15 (2006), Nr. -1, S. 1–97
- [SZSY11] SHADLOO, Mostafa S. ; ZAINALI, Amir ; SADEK, Samir H. ; YILDIZ, Mehmet: Improved Incompressible Smoothed Particle Hydrodynamics method for simulating flow around bluff bodies. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 200 (2011), Nr. 9–12, S. 1008 – 1020. – ISSN 0045-7825

- [UR10] ULRICH, Christian ; RUNG, Thomas: Multiphysics SPH for Harbor And Ocean Engineering Hydrodynamics. In: *European Conference on Computational Fluid Dynamics 5* (2010)
- [Wen95] WENDLAND, Holger: Piecewise polynomial, positive definite and compactly supported radial functions of minimal degree. In: *Advances in Computational Mathematics* 4 (1995), Nr. 1, S. 389–396
- [Wen96] WENDLAND, Holger: *Konstruktion und Untersuchung radialer Basisfunktionen mit kompaktem Träger*, Georg-August Universität Göttingen, Diss., 1996
- [Wen05] WENDLAND, Holger: *Scattered Data Approximation*. Cambridge University Press, 2005
- [You11] YOUNG, Peter: *Physics 115/242, Computational Physics*. The leapfrog method and other symplectic algorithms integrating Newton’s law of motion, 2011
- [YS07] YILDIZ, Mehmet ; SULEMAN, Afzal: SPH with improved ghost particle boundary treatment. In: *SHPERIC - Smoothed Particle Hydrodynamics European Research Interest Community*, 2007, S. 71–74